

# 中国科学技术大学 博士学位论文



## 半导体、石墨烯、拓扑绝缘体以及多铁氧化物中二维电子系统的自旋动力学的理论研究

作者姓名: 张鹏  
学科专业: 凝聚态物理  
导师姓名: 吴明卫教授  
完成时间: 二零一三年五月



University of Science and Technology of China

A dissertation for doctor's degree



# Spin Dynamics of Two-Dimensional Electrons in Semiconductors, Graphene, Topological Insulators, and Multiferroic Oxides

Author's name : Peng Zhang

Speciality : Condensed Matter Physics

Supervisor : Prof. Dr. Ming-Wei Wu

Finished time : May, 2013



## 中国科学技术大学学位论文原创性声明

本人声明所呈交的学位论文，是本人在导师指导下进行研究工作所取得的成果。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。与我一同工作的同志对本研究所做的贡献均已在论文中作了明确的说明。

作者签名：\_\_\_\_\_

签字日期：\_\_\_\_\_

## 中国科学技术大学学位论文授权使用声明

作为申请学位的条件之一，学位论文著作权拥有者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《中国学位论文全文数据库》等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。本人提交的电子文档的内容和纸质论文的内容相一致。

保密的学位论文在解密后也遵守此规定。

公开  保密（\_\_\_\_年）

作者签名：\_\_\_\_\_

导师签名：\_\_\_\_\_

签字日期：\_\_\_\_\_

签字日期：\_\_\_\_\_



# 摘要

自旋电子学是研究和利用电子的自旋自由度来取代或者结合电荷自由度的一门学科，尤其以固态系统为研究主体。它的目标是为新一代的电子学器件的设计和应用提供一种方案。这种新一代的电子学器件在传统的标准微电子工艺中结合进自旋依赖的效应。这种效应来自于电子的自旋与材料本身或者外在的磁、电和光学因素的相互作用。为了实现这个目标，理解各种载体中不同电子体系的自旋动力学，包括自旋弛豫和自旋输运，是非常必要的。基于这种需要，二维电子系统，尤其是存在于半导体量子阱或者异质结中的电子系统，在过去的几十年中得到了广泛的研究。最近，单层或者双层石墨、拓扑绝缘体的表面态以及绝缘体氧化物的界面如  $\text{LaAlO}_3/\text{SiTiO}_3$ ，也在一定程度上因为它们的二维性质而引起了人们的很大关注。这篇论文主要从理论上研究了在传统半导体、石墨烯、拓扑绝缘体以及多铁氧化物中的二维电子系统的自旋弛豫和输运。全文结构如下。

在第 1 章的背景介绍中，我们首先简要回顾了自旋电子学的发展，论述了实现自旋电子器件的关键要素，如自旋的产生和探测。接着我们介绍了时间域里自旋的主要弛豫机制，包括 D'yakonov-Perel', Elliot-Yafet 和 Bir-Aronov-Pikus 机制，以及由于空间上自旋轨道耦合的涨落造成的自旋翻转散射所导致的自旋弛豫机制。除此外，我们还简要明确了空间域的输运过程中的自旋弛豫机制。

在第 2 章，我们逐一介绍了这篇论文中所研究的材料和其中的电子系统。我们首先给出 III-V 族半导体如 GaAs 的能带结构及有效哈密顿量。接着，我们介绍被视为严格二维体系的石墨烯，并且从紧束缚模型的角度分析了高对称点处的电子（无质量的 Dirac 费米子）的有效哈密顿量。然后，我们转向拓扑绝缘体，如具有代表性的二维 HgTe 量子阱以及体的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 。我们展示了拓扑绝缘体的边界态和表面态，这是一种具有类金属的传导性和自旋的螺旋性的、受时间反演对称保护的电子系统。我们从  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  方法以及不变量方法两个角度引入了边界态和表面态的有效哈密顿量。最后，我们对多铁材料做了一个简要介绍。在第 3 章，我们特别对石墨烯中自旋动力学的研究现状做了一下介绍。

在第 4 章，我们首先介绍动力学自旋 Bloch 方程。本篇论文中关于自旋动力学的研究都是基于这种动力学自旋 Bloch 方程方法。接着，从动力学自旋 Bloch 方程出发，我们从微观的角度论述了时间域以及空间域的自旋弛豫机制。之后从第 5 到第 10 章，我们分别对半导体、石墨烯、拓扑绝缘体表面态以及多铁氧化物界面中的二维电子系统的自旋动力学进行研究。

我们首先在第 5 章研究了半导体量子阱中的自旋弛豫。具体包含下面这些内容。

我们从实验和理论上研究了室温下本征的 (001) GaAs 量子阱中的自旋弛豫。实验数据来自时间分辨的圆偏光泵浦—探测光谱。实验结果显示，随着电子（空穴）浓度的增大，自旋弛豫时间先增大然后缓慢下降。我们用包含了 D'yakonov-Perel' 和 Bir-Aronov-Pikus 自旋弛豫机制的完全微观的计算很好地重复出了实验观察到的现象，并且揭示：当浓度低的时候，Dresselhaus 自旋轨道耦合的线性项占主导，这时候随着浓度的增大自旋弛豫时间变长；当浓度足够高的时候，Dresselhaus 自旋轨道耦合的三次方项变得重要，使得自旋弛豫时间随浓度的变大而下降。

我们接着研究了高温下  $n$  型 (001) GaAs 量子阱在阱平面内存在电场情况下的涉及多能谷的自旋弛豫。我们的研究表明，由于  $L$  能谷大的自旋轨道耦合以及强的  $\Gamma$ - $L$  能谷间散射， $L$  能谷扮演了自旋极化的“漏”（“drain”）的角色。随着电场的增大，整个电子系统的自旋弛豫时间先增大后减小。小电场区自旋弛豫时间随电场增大而变长是由热电子效应使得电声散射增强造成的；大电场区自旋弛豫时间随电场增大而减小一方面是由于  $\Gamma$  能谷的电子占据高动量态使得自旋进动的非均匀扩展变强，另一方面是由于更多的电子占据了自旋弛豫非常快的高的  $L$  能谷。

除了电子系统，我们还研究了 (001) 方向生长的加了应力和门电压的 Si/Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> 和 Ge/Si<sub>0.3</sub>Ge<sub>0.7</sub> 量子阱中空穴的自旋弛豫。我们首先从六带的 Luttinger  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量出发，利用子带的 Löwdin 微扰理论得到了量子阱中最低空穴子带的有效哈密顿量，包括 Rashba 自旋轨道耦合。我们发现，在 Si/SiGe (Ge/SiGe) 量子阱中，最低的空穴子带是轻（重）空穴型的。在我们所考察的温度、空穴/杂质浓度和门电压范围内，对于 Si/SiGe (Ge/SiGe) 量子阱，计算得到的自旋弛豫时间在 1~100 ps (0.1~10 ps) 的量级。我们的研究还表明，空穴—声子的散射很弱，从而在没有杂质（低杂质浓度）的样品中突出了库仑散射的重要性。随着温度的变化，Si/SiGe 量子阱中的空穴系统一直处于强散射区，但是 Ge/SiGe 量子阱中的空穴系统既可以处在强散射区也可以处在弱散射区。在没有杂质时，两种量子阱中，库仑散射在自旋弛豫时间对温度的依赖中导致了一个峰，它出现在从简并区到非简并区的过渡位置。除此外，对于 Ge/SiGe 量子阱，库仑散射还在自旋弛豫时间对温度的依赖中导致了一个谷，这个谷出现在从弱散射区到强散射区的过渡位置。

在上面的研究中，根据文献中普遍采用的近似，声子都是被假设处在平衡态的。但是，实际上，当电子系统远离平衡时，声子也可以被电子驱离平衡，并进而反过来影响电子的动力学，包括自旋动力学。为了考察这个效应，我们在  $n$  型 (001) GaAs 量子阱中将纵向光学声子考虑成非平衡的，研究了电场下热电子的自旋弛豫。我们发现，和将声子处理成平衡态的情形比起来，自旋弛豫时间变长了，主要是因为电子的热化加强使得电声散射变强。但是，大致和电子漂移速率成正比的自旋进动频率，却或增大或减小，具体依赖于电场的强度和晶格的温度。

在第 6 章中，我们研究半导体量子阱中的自旋输运。在有 Dresselhaus 和（或）Rashba 自旋轨道耦合因而有 D'yakonov-Perel' 弛豫机制存在的情况下，比如在 III-V 族的半导体中，自旋的输运已经得到了比较广泛的研究。在这里，我们考察对称的 Si/SiGe 量子



阱。这个系统中没有 D'yakonov-Perel' 弛豫机制，但是我们在量子阱平面内加了磁场。通过这个研究，我们再一次强调，即使没有来自于 Dresselhaus 和（或）Rashba 自旋轨道耦合的动量依赖的有效磁场，单独的静磁场也可以造成在空间域自旋进动的非均匀扩展。这个非均匀扩展，连同散射，导致自旋输运过程中不可逆的自旋弛豫。实际上，在 Appelbaum 等人关于体 Si 的自旋输运的实验中 [Nature **447**, 295 (2007)]，这个机制是非常重要的。

在第 7 章，我们进入到石墨烯的研究。石墨烯中的电子是无质量的 Dirac 费米子，具有线性能谱。关于石墨烯中起主导作用的自旋弛豫机制很受争论。我们的研究试图理解石墨烯中的主要弛豫机制。由于门电压和石墨烯结构上的弯曲导致的 Rashba 自旋轨道耦合所决定的自旋弛豫时间比实验上观察到的值 ( $\sim 100-1000$  ps) 长大约 3 个量级，我们考虑进了附着原子的效应。附着原子被认为可以局域上非常可观的增强 Rashba 自旋轨道耦合。除此之外，附着原子也可以提供库仑散射中心。由于附着原子分布的随机性，Rashba 场实际上也是空间涨落的。这种随机的 Rashba 场通过造成自旋翻转散射贡献自旋的弛豫，因此表现出一种类似 Elliot-Yafet 的自旋弛豫机制。在我们的研究中，D'yakonov-Perel' 和这种 Elliot-Yafet 的自旋弛豫机制都被考虑了进来。通过拟合和比较 Groningen 的小组 [Józsa *et al.*, Phys. Rev. B **80**, 241403(R) (2009)] 和 Riverside 的小组 [Pi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **104**, 187201 (2010); Han and Kawakami, *ibid.* **107**, 047207 (2011)] 的实验（这些实验中有的体现 D'yakonov-Perel' 机制表现的常规性质，即自旋弛豫率和动量弛豫率成反比，而有的体现 Elliott-Yafet 机制表现的常规性质，即自旋弛豫率和动量弛豫率成正比），我们倾向于认为 D'yakonov-Perel' 弛豫机制在石墨烯中占主导。后来 Jo 等人观察到的自旋弛豫时间随扩散系数的非单调的依赖性质 [Phys. Rev. B **84**, 075453 (2011)] 也被我们的模型很好地重复出来。在这个研究的最后，我们还对石墨烯中自旋弛豫的实验研究的最新进展进行了介绍。新的实验给出了自旋弛豫时间对动量散射的不敏感性。结合新的实验，我们对可能的主导的自旋弛豫机制重新进行了讨论。在这一章的最后，我们还研究了低迁移率波纹状石墨烯中的自旋弛豫。这种波纹状的结构弯曲不仅导致局域的 Rashba 自旋轨道耦合，而且还在两个谷中引入方向相反的有效静磁场，从而导致谷间的非均匀扩展。在谷间电声散射的作用下，自旋会非常有效的弛豫。这个效应在室温附近重要，可以导致最小达 100 ps 量级的自旋弛豫时间。

第 8 章里，在 D'yakonov-Perel' 机制的框架下，我们研究了石墨烯中的自旋输运。我们假设 Rashba 自旋轨道耦合被涨落的衬底和附着原子大大增强。通过拟合 Pi 等人用 Au 原子进行表面掺杂得到的自旋弛豫时间对 Au 原子浓度的依赖 [Phys. Rev. Lett. **104**, 187201 (2010)]，我们发现随着 Au 原子浓度的变大，Rashba 自旋轨道耦合的系数从 0.15 增到 0.23 meV。在这个强的自旋轨道耦合下，我们计算得到的自旋输运的长度和实验值是可比的，都在  $\mu\text{m}$  量级。我们发现，在强的散射极限（这里电子-杂质散射占主导），自旋的扩散仅仅由 Rashba 自旋轨道耦合强度决定，而对温度、电子浓度和散射不敏感。但是，当沿着自旋注入的方向施加电场时，自旋输运的长度可以被电场

或者电子浓度调节。同时，我们的研究还表明自旋输运对于注入的自旋的极化方向有各向异性的依赖。这个各向异性不同于由简单的两分量漂移-扩散模型给出的各向异性。

在研究完石墨烯中无质量费米子的自旋动力学后，我们在第 9 章研究了拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的表面态在高电场下（可达几个  $\text{kV}/\text{cm}$ ）的热电子输运和自旋弛豫。在该表面上，除非温度特别低，电子-表面光学声子的散射占主导。由于导带和价带的自旋混合，电场除了在各个带内加速电子，还会导致带间的进动。在有电场的情况下，电子可以通过带间的电声散射和带间的进动从价带转移到导带。另外，我们还发现，由于自旋-动量的锁定，电场会导致一个平面内横向的自旋极化，其幅度与动量散射时间成正比。我们的研究还表明由于  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  中大的相对静态介电常数，库仑散射非常弱，以至于在电场驱动下电子不能建立具有统一热电子温度的漂移费米分布。当我们在稳态时把电场撤掉，热化的电子会冷却到初始的费米分布，但是需要的时间（反应了能量弛豫的速率）非常长（100-1000 ps 的量级）。同时，之前电场下产生的自旋极化也会弛豫，其所用的时间在动量的弛豫时间量级（0.01-0.1 ps）。

这篇论文以在 15 K 的温度下对生长在多铁材料  $\text{TbMnO}_3$  上的氧化物  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处二维电子气里的自旋扩散的研究（第 10 章）作为结束。 $\text{TbMnO}_3$  里  $\text{Mn}^{3+}$  的螺旋磁矩与  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处扩散的自旋发生 Heisenberg 交换相互作用。我们的研究表明，由于这个相互作用，在  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处的二维电子气的自旋扩散长度是有限的，不管注入的自旋的极化方向如何。之前 Jia 和 Berakdar 预言，在这个二维电子气中，当注入的自旋的极化与  $\text{TbMnO}_3$  中磁矩的螺旋平面垂直时，自旋将不会弛豫 [Phys. Rev. B **80**, 014432 (2009)]，也即有恒久的自旋流。我们的研究表明他们的这个预言是不成立的。

在第 11 章，我们对本论文的内容做了总结。

**关键词：** 半导体 石墨 拓扑绝缘体 多铁材料 氧化物界面 自旋弛豫 自旋输运 多体系统

# Abstract

Spintronics refers to a technology exploiting the spin degree of freedom instead of or in addition to the charge degree of freedom of electrons, especially in solid-state systems. Its aim is to offer opportunities for a new generation of devices combining standard microelectronics with spin-dependent effects that arise from the interaction between electron spin and the optical, electrical, or magnetic properties of the materials or external fields. To achieve this object, it is quite essential to understand the spin dynamics, including the spin relaxation and transport, of different electron systems in various hosts. For this reason, the two-dimensional electron system, especially in the semiconductor quantum wells or heterostructures, has been extensively studied in the past decades. Recently, partly due to the two dimensionality, the single-layer or bilayer graphene, the surface of topological insulators, and also the interface of insulating oxides such as  $\text{LaAlO}_3/\text{SiTiO}_3$  have attracted much attention. This dissertation focuses on the theoretical study on spin relaxation and transport of the two-dimensional electron system in semiconductors, graphene, topological insulators and multiferroic oxides. It is organized as follows.

In the introduction (Chapter 1), we first briefly review the background of spintronics. The key factors in realizing spintronic devices, such as the spin generation and detection, are reviewed. We then summarize the main spin relaxation mechanisms in the time domain, including the D'yakonov-Perel', Elliot-Yafet and Bir-Aronov-Pikus mechanisms as well as the spin-flip scattering due to the randomness of the spin-orbit coupling. We also specify the mechanism for spin relaxation during transport, i.e., in the spatial domain.

In Chapter 2, we introduce the materials and systems studied in this dissertation. The band structure and effective Hamiltonian are given for the usual zincblende group III-V semiconductors such as GaAs. The single-layer graphene, which is deemed to be strictly two dimensional, is also introduced, with the effective Hamiltonian for the massless Dirac Fermions at high symmetry points given from a viewpoint of tight binding model. We then turn to the topological insulators, e.g., the representative two dimensional HgTe quantum wells and bulk  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . The metallic and helical edge or surface states in the topological insulators are presented, with the effective Hamiltonian introduced from the  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  and invariant methods. After that, we briefly introduce the multiferroic materials. In Chapter 3, we review the status of research on spin dynamics in graphene.

In Chapter 4, we present at first the kinetic spin Bloch equations, based on which all

the studies on spin dynamics included in this dissertation are performed. Then starting from these equations, we explain the spin relaxation mechanisms in both time and spatial domains in detail, based on a microscopic viewpoint. From Chapter 5 to 10, we present our studies on spin dynamics in two dimensional electron systems formed in the semiconductors, the single-layer graphene, the surface of topological insulators and the multiferroic oxide interface, respectively.

We first study the spin relaxation in semiconductor quantum wells in Chapter 5.

The carrier density dependence of electron spin relaxation in an intrinsic (001) GaAs quantum well at room temperature is investigated both experimentally and theoretically. The experimental data are from the time-resolved circularly polarized pump-probe spectroscopy, and indicate that the spin relaxation time first increases and then slightly decreases with the increase of electron (hole) density. Our fully microscopic calculation with both the D'yakonov-Perel' and the Bir-Aronov-Pikus mechanisms included reproduces the observed phenomenon very well. It is revealed that the spin relaxation time first increases with density in the relatively low density regime as the linear Dresselhaus spin-orbit coupling terms are dominant, and then tends to decrease when the density is large as the cubic Dresselhaus spin-orbit coupling terms become important.

We then study the multi-valley spin relaxation in *n*-type (001) GaAs quantum wells with an in-plane electric field at high temperature. We demonstrate that *L* valleys play the role of a “drain” of the total spin polarization due to the large spin-orbit coupling there and the strong  $\Gamma$ -*L* inter-valley scattering. With the increase of the electric field, the spin relaxation time first increases due to the hot-electron effect and then decreases due to both the enhanced inhomogeneous broadening in  $\Gamma$  valley and the increase in occupation of electrons in higher *L* valleys where the spin relaxation takes place fast.

Apart from electrons, we also investigate the hole spin relaxation in (001) strained asymmetric Si/Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> (Ge/Si<sub>0.3</sub>Ge<sub>0.7</sub>) quantum wells under gate voltage. The effective Hamiltonian, including the Rashba spin-orbit coupling, of the lowest hole subband is obtained by the subband Löwdin perturbation method starting from the six-band Luttinger  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  model. It is found that the lowest hole subband in Si/SiGe (Ge/SiGe) quantum wells is light (heavy)-hole like. The spin relaxation time is calculated to be of the order of 1~100 ps (0.1~10 ps) in Si/SiGe (Ge/SiGe) quantum wells, for the temperatures, carrier/impurity densities and gate voltages of our consideration. Our study reveals that the hole-phonon scattering is very weak, making the hole-hole Coulomb scattering become very important in the impurity-free samples. With the change of temperature, the hole system in Si/SiGe quantum wells is generally in the strong scattering limit, while that in Ge/SiGe quantum wells can be in either the strong or weak scattering limit. In the absence of impurities, the Coulomb scattering leads to a peak in the temperature dependences of

---

---

spin relaxation time in both the Si/SiGe and Ge/SiGe quantum wells, located around the crossover from the degenerate to nondegenerate regimes. Besides, the Coulomb scattering also leads to a valley in the temperature dependence of spin relaxation time in Ge/SiGe quantum wells, around the crossover from the weak to strong scattering limit.

In the above studies, phonons are assumed to be equilibrium phonons, following the widely adopted approximation in the literature. However, in fact, when the carriers are far away from the equilibrium, phonons can be driven away from the equilibrium by carriers as well and in turn affect the electron dynamics. To look into this effect, we perform a study on hot-electron spin relaxation in  $n$ -type (001) GaAs quantum wells under the electric field, with the longitudinal optical phonons considered to be nonequilibrium. It is found that when the phonons are treated as the nonequilibrium rather than the equilibrium ones, the spin relaxation time is increased since the electron heating is enhanced and hence the electron-phonon scattering is strengthened. However, the frequency of spin precession, which is roughly proportional to the electron drift velocity, can be either increased or decreased, depending on the electric field strength and/or the lattice temperature.

We then go on to study spin transport in semiconductor quantum wells in Chapter 6. The spin transport in quantum wells, in the presence of the Dresselhaus and/or Rashba spin-orbit coupling and hence the D'yakonov-Perel' spin relaxation mechanism, has already been investigated in group III-V semiconductors. Here we carry out the study in symmetric Si/SiGe quantum wells where the D'yakonov-Perel' spin relaxation mechanism is absent but with a static magnetic field in the Voigt configuration. Through this study, we emphasize that even without the momentum dependent effective magnetic field from the spin-orbit coupling, the static magnetic field alone can still cause inhomogeneous broadening in spin precessions in the spatial domain. This inhomogeneous broadening together with the scattering leads to an irreversible spin relaxation along with the spin transport. This mechanism exactly applies to the experiment on spin transport in bulk Si with a magnetic field by Appelbaum *et al.* [Nature **447**, 295 (2007)].

In Chapter 7, we turn to the single-layer graphene where the electrons are massless Dirac Fermions with linear dispersion. The dominant spin relaxation mechanism in graphene is under debate and our study aims to understand the main spin relaxation mechanism there. As the Rashba spin-orbit coupling induced by the gate voltage and/or curvature leads to a spin relaxation time about three orders larger than the experimental measurement ( $\sim 100$ - $1000$  ps), we take into account the effect of adatoms, which can enhance the Rashba spin-orbit coupling locally and substantially. Besides, the adatoms also serve as Coulomb potential scatterers. Due to the random distribution of adatoms, the Rashba field is actually fluctuating. The randomness of the Rashba field causes spin relaxation by spin-flip scattering, manifesting itself as an Elliott-Yafet-like mechanism. In

our study, both the D'yakonov-Perel' and the Elliott-Yafet-like mechanisms are considered. By fitting and comparing the experiments from the Groningen group [Józsa *et al.*, Phys. Rev. B **80**, 241403(R) (2009)] and Riverside group [Pi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **104**, 187201 (2010); Han and Kawakami, *ibid.* **107**, 047207 (2011)] which show either D'yakonov-Perel'- (with the spin relaxation rate being inversely proportional to the momentum scattering rate) or Elliott-Yafet-like (with the spin relaxation rate being proportional to the momentum scattering rate) properties, we suggest that the D'yakonov-Perel' mechanism dominates the spin relaxation in graphene. The later experimental finding of a nonmonotonic dependence of spin relaxation time on diffusion coefficient by Jo *et al.* [Phys. Rev. B **84**, 075453 (2011)] is also well reproduced by our model. At the end of this study, we also introduce the newest experimental progress on spin relaxation in graphene and rediscuss the possibly dominant spin relaxation. After that, we study spin relaxation in low-mobility rippled graphene. In this structure, the ripples does not only lead to Rashba spin-orbit coupling, but also induces a Zeeman-like spin-orbit coupling with opposite effective magnetic fields in two valleys. The joint effect of this Zeeman-like spin-orbit coupling and the intervalley electron-optical phonon scattering opens a spin relaxation channel, which manifests itself in low-mobility samples with the electron mean free path being smaller than the ripple size. This spin relaxation channel contributes to spin relaxation effectively around room temperature, leading to a spin relaxation time around 100 ps.

In Chapter 8 the spin transport in graphene is studied in the framework of the D'yakonov-Perel' mechanism with the Rashba spin-orbit coupling enhanced by the fluctuating substrate as well as the adatoms. By fitting the Au doping dependence of spin relaxation from Pi *et al.* [Phys. Rev. Lett. **104**, 187201 (2010)], the Rashba spin-orbit coupling coefficient is found to increase approximately linearly from 0.15 to 0.23 meV with the increase of Au density. With this strong spin-orbit coupling, the spin diffusion or transport length is comparable with the experimental values ( $\sim \mu\text{m}$ ). We find that in the strong scattering limit (dominated by the electron-impurity scattering), the spin diffusion is uniquely determined by the Rashba spin-orbit coupling strength and insensitive to the temperature, electron density as well as scattering. However, with the presence of an electric field along the spin injection direction, the spin transport length can be modulated by either the electric field or the electron density. It is also shown that the spin diffusion and transport show an anisotropy with respect to the polarization direction of injected spins. This anisotropy differs from the one given by the simple two-component drift-diffusion model.

After studying the spin dynamics of massless Dirac Fermions in single-layer graphene, we proceed with the hot-carrier transport and spin relaxation on the surface of topological

---

---

insulators in Chapter 9. We investigate the charge and spin transport under high electric field (up to several kV/cm) on the surface of topological insulator  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , where the electron-surface optical phonon scattering dominates except at very low temperature. Due to the spin mixing of conduction and valence bands, the electric field not only accelerates electrons in each band, but also leads to inter-band precession. In the presence of the electric field, electrons can transfer from the valence band to the conduction one via the inter-band precession and inter-band electron-phonon scattering. Besides, we find that due to the spin-momentum locking, a transverse spin polarization, with the magnitude proportional to the momentum scattering time, is induced by the electric field. Our investigation also reveals that due to the large relative static dielectric constant, the Coulomb scattering is too weak to establish a drifted Fermi distribution with a unified hot-electron temperature in the steady state under the electric field. After turning off the electric field in the steady state, the hot carriers cool down in a time scale of energy relaxation which is very long (of the order of 100-1000 ps) while the spin polarization relaxes in a time scale of momentum scattering which is quite short (of the order of 0.01-0.1 ps).

The dissertation is closed with the study on spin diffusion at the interface of multiferroic oxides, i.e., in the two-dimensional electron gas at the interface of  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  grown on multiferroic  $\text{TbMnO}_3$ , at 15 K (Chapter 10). The spiral magnetic moments of  $\text{Mn}^{3+}$  in  $\text{TbMnO}_3$  couple with the diffusing spins at the  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  interface via the Heisenberg exchange interaction. Our study demonstrates that due to this Heisenberg exchange interaction, the spin diffusion length is always finite, despite the polarization direction of the injected spins. This result corrects the claim by Jia and Berakdar [Phys. Rev. B **80**, 014432 (2009)] that there is a persistent spin current at the interface when the injected spins are polarized perpendicular to the spiral plane of the magnetic moments of  $\text{Mn}^{3+}$  in  $\text{TbMnO}_3$ .

At last we summarize in Chapter 11.

**Key Words** : semiconductor, graphene, topological insulators, multiferroic materials, interface of oxides, spin relaxation, spin transport, many-body system.

# 目 录

中文摘要	i
英文摘要	v
第一章 背景介绍	1
1.1 自旋电子学	1
1.1.1 金属自旋电子学	1
1.1.2 半导体自旋电子学	3
1.1.3 有机自旋电子学	5
1.1.4 自旋电子学的前景	7
1.2 自旋极化的产生	8
1.2.1 光学取向	9
1.2.2 电学注入	9
1.2.3 基于其它物理效应的方法	11
1.3 自旋极化的探测	13
1.3.1 光学测量	14
1.3.2 电学测量	15
1.4 自旋的弛豫	18
1.4.1 Elliott-Yafet 自旋弛豫机制	18
1.4.2 D'yakonov-Perel' 自旋弛豫机制	21
1.4.3 Bir-Aronov-Pikus 自旋弛豫机制	23
1.4.4 自旋轨道耦合的随机涨落导致的自旋弛豫	26
1.4.5 主要的自旋弛豫机制的比较	27



1.5	自旋的运输	29
1.5.1	漂移-扩散模型	29
1.5.2	基于动力学自旋 Bloch 方程的微观理解	31
<b>第二章</b>	<b>半导体、石墨烯、拓扑绝缘体和多铁氧化物的能带结构与有效哈密顿量</b>	<b>32</b>
2.1	半导体	32
2.1.1	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法	32
2.1.2	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 哈密顿量: Kane 模型	33
2.1.3	体结构中的自旋轨道耦合	36
2.1.4	二维体系的自旋轨道耦合: 子带 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法	38
2.2	石墨烯	43
2.2.1	有效哈密顿量: 紧束缚近似方法	43
2.2.2	自旋轨道耦合的性质	48
2.2.3	远离 Dirac 点的单带有效哈密顿量	50
2.3	拓扑绝缘体	51
2.3.1	二维拓扑绝缘体	53
2.3.2	三维拓扑绝缘体	56
2.4	多铁材料	62
2.4.1	多铁材料的分类与铁电机制	63
2.4.2	TbMnO <sub>3</sub> 的多铁性	64
2.4.3	多铁氧化物界面的二维电子系统	65
<b>第三章</b>	<b>石墨烯中的自旋动力学研究</b>	<b>67</b>
3.1	石墨烯	68
3.1.1	实验研究	68
3.1.2	理论研究	76
3.2	双层和多层石墨烯	79
3.3	小结	81

---

---

<b>第四章 动力学自旋 Bloch 方程和自旋弛豫机制</b>	<b>82</b>
4.1 动力学自旋 Bloch 方程	82
4.2 时间域的自旋弛豫机制	86
4.2.1 D'yakonov-Perel' 自旋弛豫机制	86
4.2.2 Elliott-Yafet 自旋弛豫机制	88
4.2.3 其它自旋弛豫机制	89
4.3 空间域的输运过程中的自旋弛豫机制	90
4.3.1 D'yakonov-Perel' 自旋弛豫机制下的自旋输运	90
4.3.2 静磁场对自旋输运的影响	92
<b>第五章 半导体量子阱中的自旋弛豫</b>	<b>94</b>
5.1 研究背景	94
5.2 室温下本征 GaAs 量子阱中电子自旋弛豫对浓度的依赖	96
5.2.1 样品和测量	97
5.2.2 实验数据	97
5.2.3 数值结果	98
5.2.4 小结	99
5.3 GaAs 量子阱中高电场下涉及多个能谷的电子自旋弛豫	100
5.3.1 模型	101
5.3.2 数值结果	104
5.3.3 小结	108
5.4 非对称的 (001) Si/SiGe 和 Ge/SiGe 量子阱中空穴的自旋弛豫	109
5.4.1 模型	110
5.4.2 数值结果	110
5.4.3 小结	116
5.5 非平衡声子对热化电子的自旋弛豫的影响	117
5.5.1 模型	117
5.5.2 数值结果	118
5.5.3 小结	121

<b>第六章 半导体量子阱中的自旋输运</b>	<b>123</b>
6.1 研究背景	123
6.2 模型	124
6.3 只有弹性散射时的解析研究	125
6.4 数值结果	126
6.5 小结	128
<b>第七章 石墨烯中的自旋弛豫</b>	<b>129</b>
7.1 石墨烯中随机 Rashba 自旋轨道耦合导致的自旋弛豫: D'yakonov-Perel' 和类 Elliott-Yafet 自旋弛豫机制的比较	129
7.1.1 模型	130
7.1.2 只有弹性散射时的解析研究	131
7.1.3 数值结果	137
7.1.4 小结和讨论	142
7.2 低迁移率的波纹状石墨烯中的自旋弛豫	144
7.2.1 模型	145
7.2.2 数值结果	147
7.2.3 小结	152
<b>第八章 石墨烯中的自旋输运</b>	<b>154</b>
8.1 研究背景	154
8.2 模型	155
8.3 自旋弛豫	156
8.4 自旋扩散和输运: 只有弹性散射时的解析研究	157
8.4.1 自旋扩散	157
8.4.2 自旋输运	159
8.5 自旋扩散和输运: 数值结果	161
8.5.1 自旋扩散的各向异性	162
8.5.2 自旋扩散对化学掺杂的依赖	163

---

---

8.5.3	散射对自旋扩散的影响	163
8.5.4	电场下的自旋输运	164
8.6	小结以及判定石墨烯中主要的自旋弛豫机制的可能方案	165
<b>第九章</b>	<b>拓扑绝缘体表面态的输运性质和自旋弛豫</b>	<b>168</b>
9.1	研究背景	168
9.2	模型	169
9.3	低电场下只有弹性散射的解析研究	171
9.3.1	电场导致的自旋极化	172
9.3.2	无电场下的自旋弛豫	173
9.4	数值结果	174
9.4.1	电子在两个带间的重新分布	174
9.4.2	电荷和自旋的输运	176
9.4.3	库仑散射的效应	180
9.4.4	自旋弛豫	181
9.5	小结	182
<b>第十章</b>	<b>多铁氧化物界面处二维电子系统的自旋输运</b>	<b>183</b>
10.1	研究背景	183
10.2	模型	183
10.3	SU(2) 规范变换与有效磁场	184
10.4	螺旋空间里的自旋弛豫	185
10.5	自旋的扩散	186
10.5.1	无散射时的解析解	186
10.5.2	包含库仑散射的数值解	187
10.6	小结	188
<b>第十一章</b>	<b>总结</b>	<b>189</b>
<b>附录A</b>	<b>Si/SiGe 和 Ge/SiGe 量子阱中空穴子带包络函数 <math>\Psi_{\lambda\alpha n}</math> 的求解</b>	<b>192</b>

参考文献	195
本硕博期间发表的论文	218
致谢	220



# 第一章 背景介绍

## 1.1 自旋电子学

自旋电子学 (spintronics) 是研究和利用电子的自旋自由度来结合或者取代电荷自由度的一门学科 [1-13]。在过去的 20 年左右的时间里, 人们对于它的研究已经在器件设计、实验手段和理论方法上取得了大的进展。在个别方面比如信息存储上, 自旋电子学已经实现了技术上的应用, 极大地影响了人们的生活。对于未来, 自旋电子学具有广阔的前景, 它的发展可能会导致某些领域如量子计算的重大突破。在这里, 我们从自旋电子学的起源出发, 简要介绍它在各领域的发展状况。

### 1.1.1 金属自旋电子学

虽然自旋电子学这个词汇最先由 Wolf 在 1996 年向美国国防部高等研究计划局申请磁性材料和器件的研究的提案中使用 [4, 5, 14], 但是自旋电子学的起源最早可以追溯到自 1968 年开始的利用光学取向方法对半导体中的自旋进行操控的研究 [1, 15, 16]。尽管如此, 人们一般还是认为自旋电子学开端于 1988-1989 年对巨磁阻 (giant magnetoresistance, GMR) 效应的重要发现。这个效应是由 Fert 的小组 [17] 在 Fe-Cr 超晶格结构中以及 Grünberg 的小组 [18] 在 Fe-Cr-Fe 这种“铁磁金属/正常金属/铁磁金属”三明治结构中分别发现的。该效应表现为外在磁场能够引起两层铁磁金属的磁矩的相对取向的变化, 从而导致电阻值的明显改变 ( $\frac{R_0 - R_H}{R_H} \sim 100-150\%$ ,  $R_0$  和  $R_H$  分别是无磁场和有磁场时候的电阻)。基于这一性质, GMR 效应可以用来对磁信号进行灵敏探测。随后得益于自旋阀 (spin valve) 结构的发展 [19], 1997 年, IBM 制成了首个利用 GMR 效应的硬盘读磁头, 引发了硬盘的“大容量、小型化”革命, 给人们的生活带来深刻的影响。Fert 和 Grünberg 因为对 GMR 效应的发现而获得了 2007 年的诺贝尔物理学奖。

对 GMR 效应的研究和利用, 属于金属自旋电子学 [5, 12, 20, 21] 的范畴。该领域主要关心载流子自旋和磁性金属的磁矩的相互作用。实际上, 对于磁阻效应, 还有在更广范围内的更多研究, 它们不完全单纯的局限于金属。这些研究包括庞磁阻 (colossal magnetoresistance, CMR) 效应 [22]、隧道磁阻 (tunneling magnetoresistance, TMR) 效应 [23, 24] 和异常磁阻 (extraordinary magnetoresistance, EMR) 效应 [25] 的发现。CMR 效应是在类钙钛矿结构的锰氧化物如  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ 、 $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  中发现

的，和 GMR 效应比较起来，它导致的电阻变化可以大好几个量级（在  $\text{Nd}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_{3-\delta}$  薄膜中，Xiong 等人观察到 CMR 效应导致最大达  $10^6\%$  量级的电阻变化 [26]）。具有 CMR 效应的材料也被认为可应用于大容量磁性储存装置的读写头，但是由于它较低的相变温度以及导致电阻的明显变化需要大到几个特斯拉的磁场，在实际应用中还有些困难。TMR 效应是在“铁磁金属/绝缘体/铁磁金属”三明治结构中发现的。目前，利用 TMR 效应制成的磁头已经广泛地应用到硬盘中。比起 GMR 磁头，TMR 磁头除了具有更好的灵敏度以及抗静电和抗高温能力，它的电流垂直于膜面（current perpendicular to plane, CPP） [5] 的几何结构进一步提高了存储密度。另外，利用具有 GMR 或 TMR 效应的自旋阀为基本单元可以制成磁随机存储器（magnetoresistive random access memory, MRAM）。和传统的动态随机存储器相比，MRAM 除了具有集成度高和快速读写等特点，一个显著的优点是非易失性。作为一种通用存储器（可同时用于计算机的内存储和外存储），MRAM 已经从 2006 年 Freescale 公司推出第一款量产的产品开始走向了商业应用。EMR 效应则是在 2000 年由 Solin 小组在非磁性的半导体-金属复合结构如  $\text{InSb-Au}$  中发现的 [25]，它是迄今为止已知的最大的物理磁阻效应。但是 EMR 效应是由于磁场下电荷受到洛伦兹力产生轨道偏转导致的，因而没有进入自旋电子学的范畴。

上面提到的 GMR 效应所基于的原理，可以由自旋上和自旋下的两通道自旋输运模型（涉及自旋守恒和自旋翻转的散射） [27] 来理解。该效应只与电子在不同自旋态上的非平衡占据以及这种非平衡占据的衰减，即自旋弛豫（spin relaxation），有关系（正是因为自旋的弛豫，使得 GMR 效应对中间层 Cr 的厚度负相关 [17]），而与电子在不同自旋态上的相位特征，也即自旋相干性（spin coherence），没有关系。因此，基于 GMR 效应所设计的自旋电子学器件又被称为“无关相干（non-coherent）的自旋电子学器件”。另一类的自旋电子学器件要求体现自旋相干性的重要性。金属里的其它效应，如自旋极化的电流导致的金属磁矩的偏转效应 [常被称为自旋转移矩（spin-transfer torque, STT）效应] [28-33] 以及自旋霍尔效应（spin Hall effect） [34] 等，可以被用于设计“相干的自旋电子学器件”。自旋转移矩效应提供了一种用电流扭转或者激发磁矩的方法，它已经被应用到第二代 MRAM（STT-MRAM）中 [35,36]。

在金属自旋电子学领域里，除了上面提到的已被熟知的效应，新的物理现象还在被不断地发现。2008 年，人们在铁磁性金属里观察到了自旋热电势（spin Seebeck）效应 [37]。将铁磁材料置于具有温度梯度的环境，不同自旋的载流子在空间建立起电势梯度。两种自旋的载流子由于热电势系数不同，它们的电势在实空间分布不一样，从而导致实空间上同一位置不同自旋的载流子的电势的差异，从而产生所谓的“自旋电压”（spin voltage）。这种自旋电压可以用上面提到的自旋霍尔效应的逆过程，逆自旋霍尔效应（inverse spin Hall effect） [38-40]，来进行探测。在图 1-1 中，我们给出了自旋热电势效应以及对其进行探测的示意图 [37]。对铁磁金属里的自旋热电势的发现开启了自旋热电子学（spin caloritronics）研究的大门 [41-50]。这些研究可能应用到热力学的自旋极化和自旋流的产生器，同样也有助于人们在热的探测和废热的回收



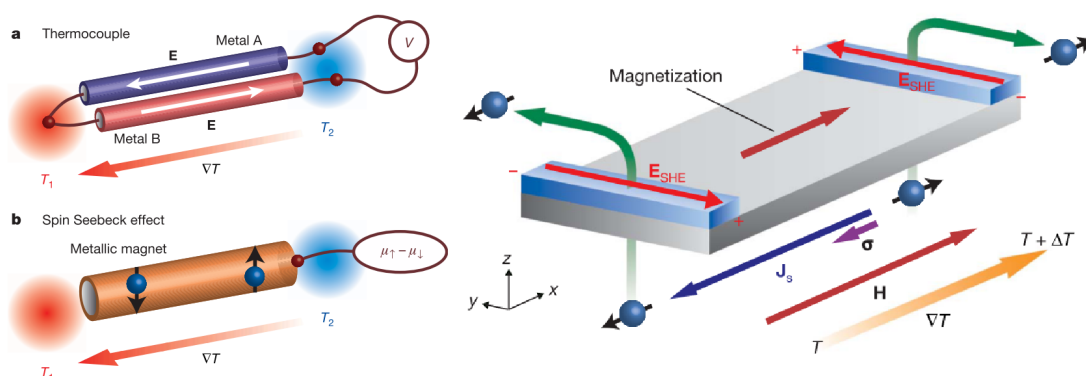


图 1-1: 左图: (a) 非磁性金属里的热电势效应和 (b) 铁磁性金属里的自旋热电势效应的示意图。右图: 在温度梯度下, NiFe 薄层 (底部的大面积部分) 里自旋热电势的产生以及通过 Pt 电极 (上面的两个细长条状部分) 应用逆自旋霍尔效应探测 NiFe 里的“自旋电压”在 Pt 里产生的自旋流的示意图。摘自文献 [37]。

利用上开启新的思路 [50]。

### 1.1.2 半导体自旋电子学

在金属自旋电子学从理论研究走向实际应用的时候, 对于半导体自旋电子学的研究—最早源自 1968 年开始的利用光学取向方法对半导体中的自旋进行操控的开创性工作 [1, 15, 16]—自上个世纪 90 年代开始有了显著的复苏 [5, 7, 8, 10, 11, 51]。这种复苏很大程度上来源于传统半导体电子学在工业上的成熟以及其未来发展所面临的限制。自 1965 年 Moore 定律被提出 [52], 在其后将近 50 年的时间里, 半导体工业的发展体现出与该定律惊人的一致—即随着微处理器性能的提升, 其集成度每 18 个月翻一番。然而随着器件尺寸的缩小, 量子效应以及散热的问题都将制约传统半导体电子学的进一步发展。因此有预测认为到 2015-2020 年间 Moore 定律将不再适用, 半导体微加工工艺达到极限。由于这个原因, 研究和下一代电子学器件变得尤为重要。考虑到传统半导体工艺的成熟度, 在半导体中研究和利用电子的自旋自由度成为极富潜力的一个方向。

半导体自旋电子学的一个目的是实现自旋晶体管, 用以替代传统的电子晶体管。自旋晶体管的可能的设计方案包括自旋场效应管 (spin field effect transistor) [53, 54]、单极自旋晶体管 [55–57]、磁  $p-n$  结 [58–60]、磁双极晶体管 [61, 62]、热电子自旋晶体管 [63–65] 等。按照 Datta 和 Das 最早提出的自旋场效应管的理论模型 (见图 1-2 中的左图), 它的“开”和“关”的状态 (由通过右端铁磁电极的电流大小表征) 由电子系综在两个铁磁电极之间的半导体通道内的运输过程中自旋绕横向有效磁场 (来自于门电压调控的 Rashba 自旋轨道耦合 [66]) 的进动决定 [53]。从这个意义上来说, Datta-Das 自旋晶体管属于“相干的自旋电子学器件”。由于自旋场效应管的操作在自旋相干性得以保持的时间内完成, 而且可以尽量避免对电荷的轨道运动造成 (大的) 影响, 也

不需要整个电子系统达到热力学平衡态，因而相较传统的电子晶体管，它具有响应快、能耗低的特点。最近二十年，为了自旋晶体管的实现，人们付出了很大努力以解决其中遇到的一些困难，包括在电学上实现有效的自旋注入和探测以及获得长的自旋相干时间，并取得了很多突破。图 1-3 展示了自 1994 年到 2006 年在半导体自旋电子学中的一些关键的实验发现 [7]，包括高效率的自旋注入 [67-72]、室温下长的自旋相干时间（相比非磁性的金属要长三个量级） [73, 74]、自旋霍尔效应 [75-79] 以及铁磁半导体中电流导致的磁畴的运动 [80] 等等。在最近的 2009 年，Koo 等人报告在 InAs 量子阱的非局域自旋阀结构中实现了 Datta-Das 自旋场效应晶体管 [81]（见图 1-2 中的右图），并引起很大的关注和争论 [82-85]。不过这些争论都集中在实验数据与没考虑散射的一维或者二维 Datta-Das 自旋晶体管模型给出的理论公式的偏离上，并不能否定 Koo 等人利用门电压对输运过程中自旋在空间的进动进行调控实现了“开”和“关”的操作这一基本事实。更重要的是，运用包含了散射的完全微观的自旋动力学 Bloch 方程 [11]，Koo 等人的实验现象可以很好的理解 [85]。因此，我们可以认为他们的研究提供了一个二维 Datta-Das 自旋晶体管的原型器件 [85]。

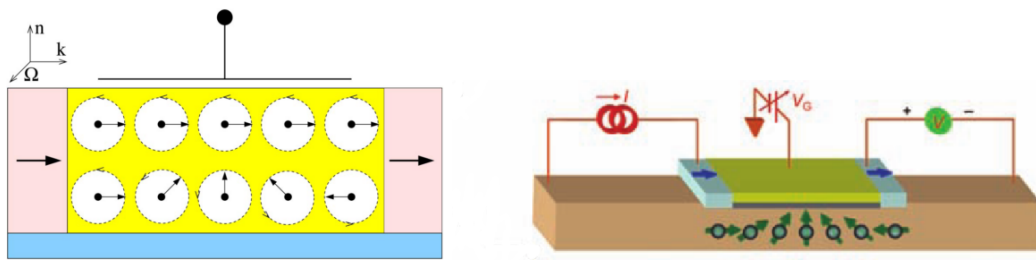


图 1-2: 左图: Datta-Das 自旋晶体管模型，最先的理论模型于 1990 年在一维体系中给出 [53]。摘自文献 [5]。右图: 2009 年 Koo 等人在 InAs 量子阱中实现的二维 Datta-Das 自旋晶体管原型器件的示意图。摘自文献 [81]。

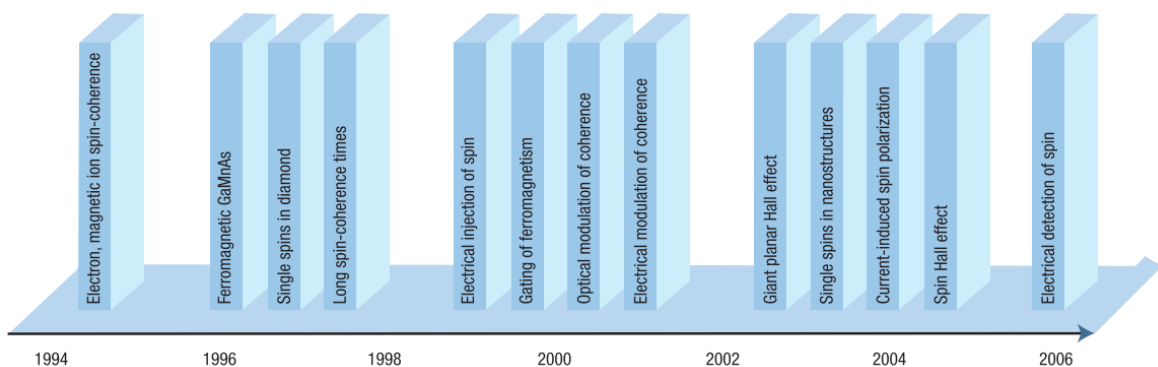


图 1-3: 自 1994 年到 2006 年，半导体自旋电子学中关键的实验发现。摘自文献 [7]。

基于自旋电子学在磁性金属和非磁性半导体里的发展，人们很自然地认识到半导体和磁性材料的结合可能会为新物理现象的发现提供更广阔的空间。这一认识促使人们对

各种半导体和磁性材料的共同体，如顺磁半导体、反铁磁半导体、铁磁半导体以及铁磁/半导体异质结等，进行了广泛的研究 [86–92]。其中，对 III-V 族半导体进行 Mn 掺杂的铁磁半导体（如  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$  和  $\text{In}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ ）尤其引人关注，部分原因在于在工艺上以及能带结构上，这些铁磁半导体和其非磁性的母体都有很大的相关性。

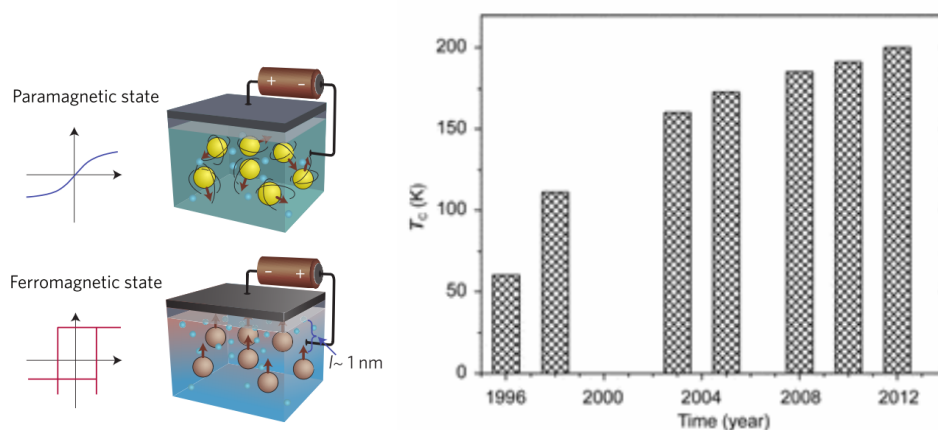


图 1-4: 左图: 铁磁半导体中通过电的方法改变载流子浓度以控制其铁磁相。摘自文献 [91]。右图: 在 GaMnAs 铁磁半导体中所获得的最高居里温度的时间线。摘自文献 [93]。

铁磁半导体中的铁磁性和半导体性质的协同作用导致了一些独特的性质。一个显著的特点是，铁磁半导体的矫顽磁场 [90]（示意图见 1-4 的左图）和居里温度 [89] 可以通过门电压对载流子的浓度进行调节而改变。造成这一现象的原因是磁性原子间的铁磁耦合是经由巡游载流子导致的间接的 RKKY（Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida）[94–96] 相互作用来实现的 [97]，而这种相互作用受到载流子浓度的调制。这种通过偏压调节铁磁性的特性是铁磁金属所不具有的。目前为止，人们的一个努力方向是提高铁磁半导体的居里温度 [93, 98, 99]，以使其满足潜在的更广泛的应用要求。以 GaMnAs 为例，通过 Mn 的重掺杂和低温淬火，现在能达到的最高的居里温度在 200 K [98]（见图 1-4 的右图）。此外，铁磁半导体中束缚住一个空穴的 Mn 离子具有强的自旋轨道耦合，因而为用电的方法操控自旋提供了一种方案 [100]。铁磁半导体里的反常霍尔效应（anomalous Hall effect）[101, 102]、平面霍尔效应（planer Hall effect）[103] 以及自旋热电势效应 [43] 也被观察到。这些效应都与铁磁半导体的本征磁矩有关。此外，铁磁半导体里电流导致的磁畴运动也已经被观察到 [80]。这个性质或许有助于基于磁性半导体的第二代 MRAM 的发展。如果基于半导体的存储技术得以实现，那么人们离将逻辑、存储甚至通讯模块在单芯片上进行高度集成这一目标就近了一步。

### 1.1.3 有机自旋电子学

最近，作为有机电子学和自旋电子学的交叉融合，一个新的领域，有机自旋电子

学，逐渐兴起 [6, 104–108]。在这个领域里，有机材料（有机金属或者有机半导体）被做为运输的载体或者调控自旋极化信号的工具。有机材料之所以进入自旋电子学领域，一方面是由于它本身所具有的与金属和晶态半导体不同的独特性质，包括成本上经济、重量上轻、力学上柔韧、化学上敏感等等。另一个比较重要的原因是，在有机材料中，由于自旋轨道耦合和超精细相互作用都非常弱，自旋弛豫/去相干时间非常长。实验表明，室温下有机材料里的自旋弛豫时间可以达到  $10^{-7}$ - $10^{-5}$  s [109]，在 100 K 以下甚至可以达到  $10^{-3}$ -1 s [110]。

目前有机自旋电子学主要关注的结构器件可以分为两类。一类器件是有机材料与磁性电极结合，研究自旋极化的注入、输运与探测，体现为磁电阻或者自旋阀效应 [110–114]。在 2002 年，Dediu 等人在  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3/\text{T}_6/\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ （中间层为有机物“齐分子聚合物六噻吩”）结构中首次实现了有机自旋阀并观察到了负的磁阻 [112]（见图 1-5）。另一类则不含磁性电极，主要体现有机材料本身所具有的磁电阻效应（organic magnetoresistance, OMR）和其它磁效应 [115–118]。这些有机磁效应可正可负，与材料、偏压或者温度有关系。对于 OMR 效应的理论研究也有一些进展 [118–120]。一个被采用比较广的理论是极化子和双极化子这两种载流子在随机超精细场和外加磁场下的跃迁模型 [119]。作为例子，在图 1-6 中我们展示了在 PEDOT/polyfluorene/Ca 结构中测量磁场效应的示意图以及磁场对电流和电致发光的影响 [115]。

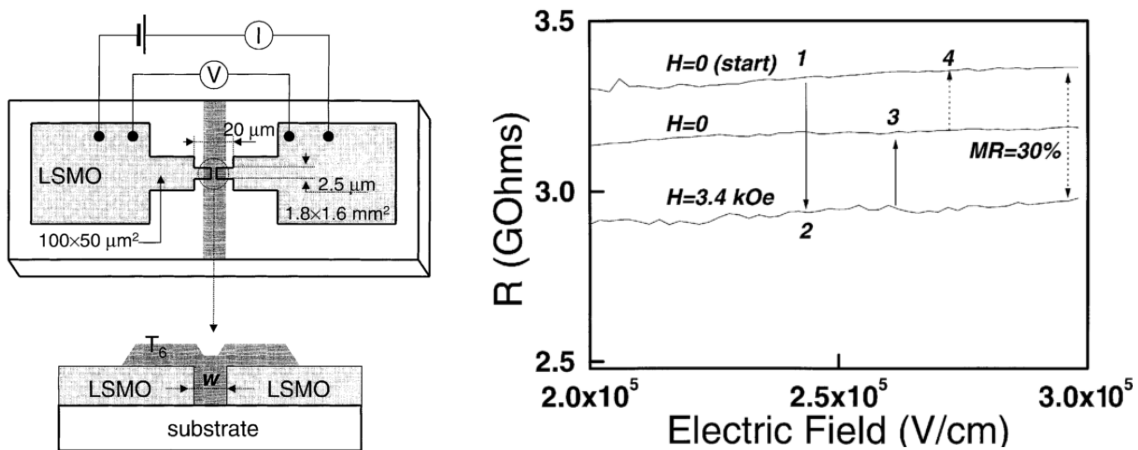


图 1-5: 左图:  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3/\text{T}_6/\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  有机自旋阀结构示意图。右图: 电阻随着磁场的变化。摘自文献 [112]。

上面所列举的例子所涉及的有机材料以薄膜的形态出现，尺度在 100 nm 的量级。现在，人们对有机自旋电子学的研究已涉及更小的尺度，如多分子甚至是单分子极限。因此，有人提出了“分子自旋电子学”（molecular spintronics）的概念 [13, 121–126]。在该领域一个比较热门的研究对象是 DNA 分子。Zwolak 和 Ventra 最先从理论上构造了 DNA 自旋阀 [127]。他们研究了与 Ni 和 Fe 电极接触的 DNA 分子，给出了 20% 左右的磁阻效应。Wang 和 Chakraborty 进一步研究了自旋在 DNA 分子中输运时的自旋

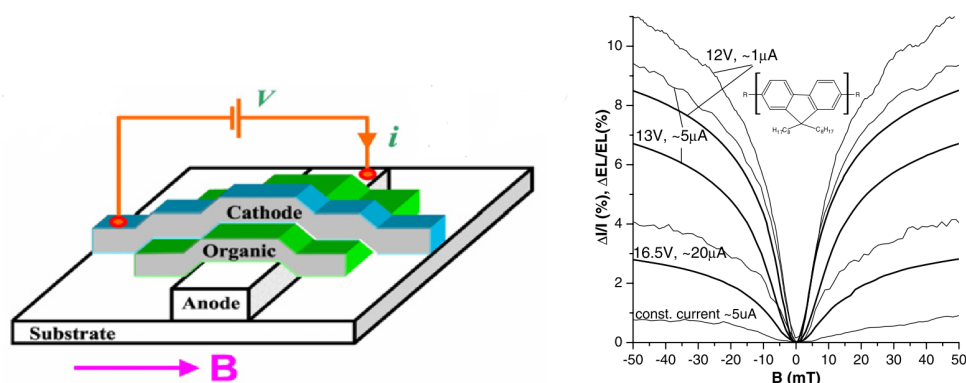


图 1-6: 左图: 有机材料的磁效应测量实验示意图。右图: PEDOT/polyfluorene ( $\approx 150$  nm)/Ca 结构中磁场对电流 (粗线) 和电致发光 (细线) 的影响。摘自文献 [115]。

翻转效应对磁阻的影响 [128]。Kang 等人研究了横向电场对于 DNA 自旋阀磁阻效应的影响 [129]。实验上, 最近 Naaman 的组在垂直于金衬底自组织生长的 DNA 双螺旋分子中发现了自旋过滤的效应 [130]。他们在室温下用紫外线垂直照射金衬底使其发射无自旋极化的电子, 电子经过 DNA 双螺旋分子层传导后具有了最高达 60% 的自旋极化, 极化的方向与电子运动的方向相反 (见示意图 1-7), 极化度与分子层的厚度正相关。这个现象在入射光为线偏光和左、右旋圆偏光的时候都存在。值得指出的是, 在 DNA 单螺旋分子中没有观察到这种自旋过滤的行为。这种基于 DNA 双螺旋分子的自旋过滤器件与其它基于有机材料的自旋过滤器件的不同之处在于这里并没有借助磁性材料, 自旋选择完全由有机分子自己实现。更进一步, Naaman 的组将 DNA 双螺旋分子与两个电极接触进行电输运测量, 再次证实了这种全有机的自旋过滤行为, 并且指出它与 DNA 分子的螺旋性和手征性有关 [131]。为了理解这种实验现象, 不同的组从理论上进行了研究 [132–137]。其中, Sun 小组基于描述 DNA 双螺旋分子中自旋输运的模型哈密顿量, 指出这种自旋过滤行为与 Rashba 自旋轨道耦合、环境导致的去相位和双螺旋性质都有关系 [132]。

#### 1.1.4 自旋电子学的前景

正如上面的简要介绍所表明的, 自旋电子学的发展导致了不同学科如物理、生物和化学的交叉和融合。可以预计, 随着自旋电子学的发展, 各学科会有更多的交叉融合, 更多新的材料将会被发现和研究。这些新材料或许可以作为传统的载体如金属或者半导体材料的替代品, 或许本身表现出独特的性质、导致新的物理现象。与此同时, 实验、理论和应用也将更加紧密结合协同作用。比如, 最近, 在碳纳米管 [6, 121]、石墨烯 [138–144]、拓扑绝缘体 [144–159] 和新型氧化物 (包括非常有吸引力的多铁氧化物) [9, 160–162] 等材料中, 自旋相关的性质正在被积极的研究。一个新的物理现象, 量子自旋霍尔效应 (quantum spin Hall effect) [163], 在被理论预言后 [164–168] 马上就被实验发现 [169–171]。

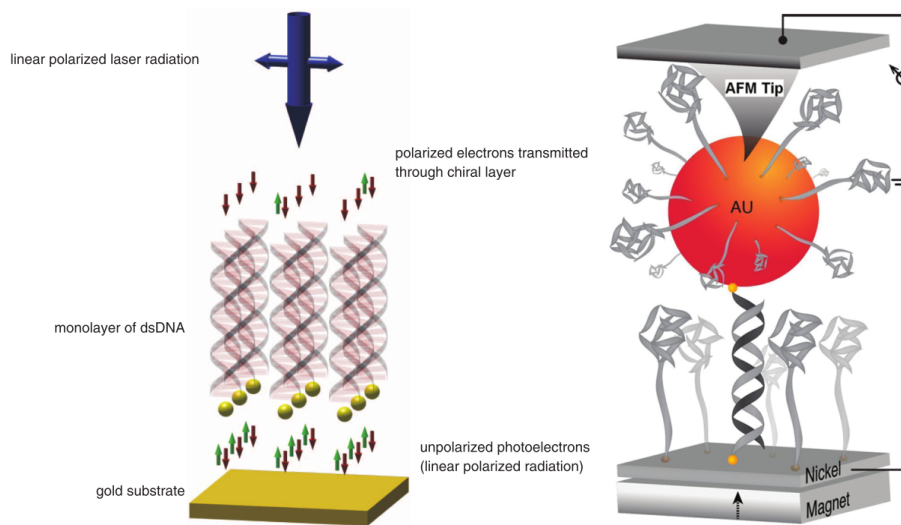


图 1-7: 左图: DNA 双螺旋分子自旋过滤器的示意图。在线偏光的照射下, 金衬底发射出自旋无极化的电子, 经由 DNA 双螺旋分子的传导后, 电子变为有自旋极化的, 极化方向与电子的运动方向相反。摘自文献 [130]。右图: 连接两个电极的 DNA 双螺旋分子的电运输结构示意图。实验发现电的输运性质与底部电极的磁矩方向密切相关。摘自文献 [131]。

除了研究范围的扩大, 自旋电子学的一个研究方向, 即对少量自旋或者单自旋进行精确操控 [172], 将会吸引人们继续为之付出努力。这种努力将促进基于自旋的量子计算 [2, 173] 的发展。实际上, 基于自旋的量子信息处理是自旋电子学最为宏大的目标之一。由于电子的自旋为  $1/2$ , 一个很自然的想法是将电子的自旋作为量子比特。但是量子计算还要求自旋去相干时间大于自旋操控时间。在 III-V 族半导体的量子点中, 电子的自旋去相干时间一般在纳秒量级 [174–176]。通过降低超精细相互作用 (比如选择原子核自旋少的材料, 以及用空穴作为自旋的载体等手段), 这个自旋去相干时间有望进一步提高。在 Si 或者石墨烯的量子点中, 由于可以忽略的超精细相互作用以及弱的自旋轨道耦合, 电子的自旋相干时间可以轻易达到秒的量级 [177–180]。因而, 将量子点阵列中的自旋作为量子计算的比特是一种可能的方案 [181]。在这个方案中, 局域的磁场被用于操控自旋, 点间的交换相互作用耦合相邻的比特并引进比特间的纠缠。最近 10 年来, 人们在少量自旋或者单自旋的研究上已经取得了长足的发展。一方面, 从单自旋的载体来说, 除了电子, 半导体中的掺杂离子 [100, 182] 和金刚石中的氮空位中心 (nitrogen-vacancy center, NV center) [183, 184] 等也被加以研究。另一方面, 对单自旋的控制, 除了用磁共振、光学操控、交换相互作用的手段外, 全电操控的方案也被发展 [173]。目前我们还不知道未来的量子计算机将以何种方式实现, 但是自旋电子学在该方向的进一步发展为人们提供了一种富有潜力的选择。

## 1.2 自旋极化的产生

为了自旋电子学器件的实验研究以及具体实现, 有效的自旋极化的产生和探测必不

可少。我们首先介绍实验上常用的产生自旋极化的手段，它们包括：利用光学选择定则的光学激发，利用电学的方法对自旋进行选择性地注入，以及利用其它一些物理效应如自由载流子光吸收、自旋霍尔效应、量子自旋霍尔效应、自旋依赖的热电势效应等产生自旋极化或者自旋极化流。

### 1.2.1 光学取向

利用光学激发产生自旋极化是在半导体中最早采用的实验方法 [1, 5]，而且沿用至今。我们以 III-V 族半导体 GaAs 为例说明它的工作原理。在图 1-8 中，我们给出了 GaAs 体材料的能带结构 (a) 和带间跃迁的光学选择 (b) 的示意图 [5]。利用能量处在  $E_g$  (带隙) 和  $E_g + \Delta_{SO}$  ( $\Delta_{SO}$  是自旋轨道劈裂能) 之间的  $\sigma^+$  左旋圆偏光从重空穴带 (heavy hole, HH) 和轻空穴带 (light hole, LH) 激发电子到导带 (conduction band, CB)。两种价带上的激发分别贡献自旋  $-1/2$  和自旋  $1/2$  的电子，但是两种电子的激发浓度比率是 3:1，于是在导带初始没有电子占据的情况下， $\sigma^+$  左旋圆偏光的激发可以产生 50% 自旋极化度的电子。同样，在  $\sigma^-$  右旋圆偏光下，也可以产生 50% 自旋极化度的电子，只不过极化方向相反。线偏光不能激发出自旋极化的电子。如果光子能量大于  $E_g + \Delta_{SO}$ ，这时自旋劈裂 (spin-split off, SO) 带也会被激发，无论是圆偏光还是线偏光都不会在导带产生自旋极化的电子 [5]。如果对体材料加约束 (如形成量子阱) 使得重空穴带和轻空穴带劈裂开，选择能量适当的圆偏光只激发重空穴带，这时候理论上可以达到 100% 的自旋极化。

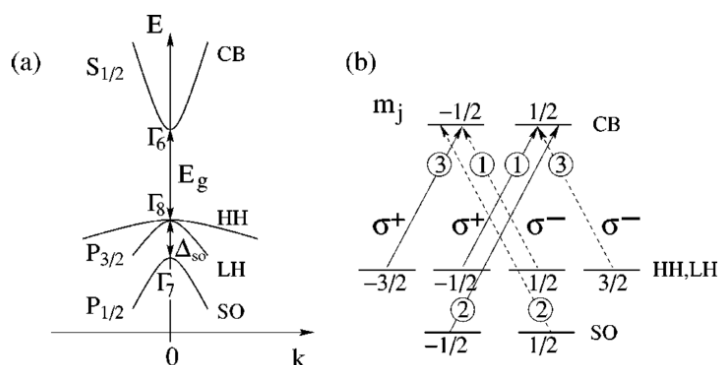


图 1-8: (a) 体 GaAs 能带结构示意图。(b) 在圆偏光  $\sigma^+$  或  $\sigma^-$  下带间跃迁的光学选择定则示意图。摘自文献 [5]。

### 1.2.2 电学注入

利用电学方法向一些材料如半导体或者石墨烯等注入自旋极化的电子是另一种常用的方法。对于半导体，人们早期希望利用铁磁金属对自旋极化的电子进行欧姆注入，即力求在铁磁金属和半导体间形成比较理想的欧姆接触界面 [14]。但是在铁磁金属和

半导体间往往会形成 Schottky 势垒影响注入。人们通过各种手段（选择合适的材料以及在半导体界面引入重掺杂区）避免在界面处形成 Schottky 势垒，但是发现自旋注入的效率仍不理想，最高不过 4.5 % [185]。在忽略界面散射的情况下，Schmidt 等人指出，欧姆接触下自旋注入效率低下的一个重要原因是铁磁金属和半导体的电导不匹配 [186]。Fert 和 Jaffrès 考虑进界面的影响，发现可以通过提高界面电阻来改善自旋注入效率 [187]。Rashba 进一步提出，在铁磁金属和半导体间增加自旋选择的绝缘层（如 MgO）有望提高自旋注入效率，因为此时自旋注入的效率主要由中间绝缘层的自旋选择效率决定 [188]。这就是现在广为采用的隧穿注入手段。典型的，在 FeCo/MgO/GaAs 隧穿结中自旋的注入效率在 100 K 可以达到 52 % [72]，从磁性半导体经过 Esaki 二极管的隧穿注入效率在低温下可以达到 80 % [189]。此外，由于 DNA 分子具有高达 60 % 极化度的自旋选择性，有人还提出铁磁金属/DNA 分子/半导体的隧穿注入模型以希望提高从铁磁金属到半导体的自旋注入效率 [130, 131]。最近，Kimura 等人报道，用自旋高度极化的半金属  $\text{Co}_2\text{FeSi}$  替代传统的铁磁材料如 Co 和 NiFe 等，可以进一步在室温下显著提高自旋的注入效率（相比 NiFe，可以提高 10 倍左右） [190]。

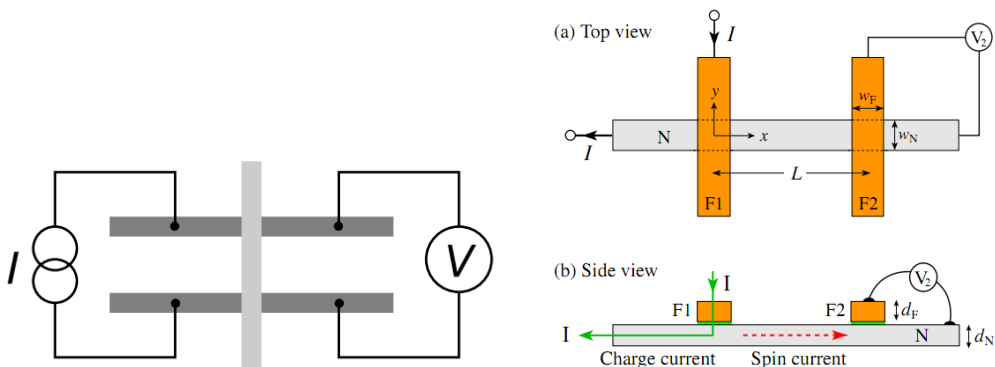


图 1-9: 左图: 局域的自旋阀结构下的直接自旋注入。水平放置的是两个铁磁电极，竖直放置的是自旋运输的通道。右图: 非局域的自旋注入的示意图。F1 和 F2 是铁磁性电极，F1 电极参与构成左侧的电流回路，其下的自旋积累向右侧扩散形成纯的自旋流。右图摘自文献 [191]。

传统的电学注入采用局域的自旋阀 (local spin valve) 结构直接注入，如图 1-9 左图所示。这种构型下只有两个电极，电流通过一个铁磁电极后变成自旋极化的流（并非纯的自旋流）。因此，在同一个回路中，自旋极化的流和电流会同时存在。为了得到纯的自旋流，现在人们广泛采用非局域的自旋注入手段 [191–197]。这种注入方式是在纵向的非局域自旋阀 (nonlocal spin valve) 结构中，一个铁磁电极（图 1-9 右图中的 F1）参与构成一侧的电流回路，同时作为注入端，它下面产生自旋极化积累并向另一侧扩散形成纯的自旋流 [如图 1-9 右图 (b) 所示]。需要指出的是，在前面图 1-2 右图所示的 Koo 等人实现的 Datta-Das 自旋场效应晶体管的原型器件中，就是通过这种非局域的手段向 InAs 量子阱的二维电子气通道中注入自旋流的。



### 1.2.3 基于其它物理效应的方法

除了以上两种传统的产生自旋极化的方法，还有一些利用其它物理效应产生自旋极化的方案。

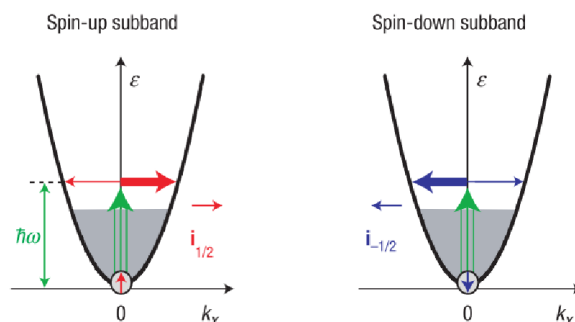


图 1-10: 带内自由载流子光吸收下非对称散射导致自旋流的示意图（两种自旋的载流子分开示意）。摘自文献 [198]。

在光学上，半导体通过带内的自由载流子吸收，在自旋依赖的散射的辅助下，可以产生自旋流 [198]。在图 1-10 中我们给出了这个过程示意图 [198]。带内非直接的光吸收涉及杂质和声子散射辅助的动量转移。由于自旋轨道耦合，一种自旋的电子向一个动量方向的散射和向相反动量方向的散射的概率不一样，从而导致自旋极化的电流。两种自旋的电子的存在将会导致纯的自旋流。但是如果施加一个外磁场使得 Zeeman 劈裂下只有一个低能的自旋带被占据，那么电流和自旋流可以同时得到。另外，利用自旋的光生伏打效应（spin photogalvanic effect）也可以在半导体中产生自旋流 [199, 200]。

在电学上，一种常被提到的方案是利用自旋霍尔效应 [75–77] 产生自旋流和自旋极化。在样品中施加静电场，由于自旋轨道耦合，运动的电子会受到自旋依赖的偏转散射（skew scattering），从而在垂直于电流的方向出现自旋流，自旋流在样品的边界积累产生自旋极化。这种效应来自于自旋依赖的散射的非对称性，又被称为外禀的自旋霍尔效应（extrinsic spin Hall effect）。实验上，人们在 *n* 型 [78]、*p* 型 [79] GaAs 和金属铝 [34] 中都观察到了外禀的自旋霍尔效应。此外，对应于外禀的自旋霍尔效应，还存在只与本征的自旋劈裂的能带结构有关而与散射无关的内禀的自旋霍尔效应（intrinsic spin Hall effect） [77, 201]。它在具有强的自旋轨道耦合和高迁移率的 HgTe 量子阱里的金属区域被观察到，也可以用来产生自旋极化流 [202]。

拓扑绝缘体的边界态也为产生自旋极化的流提供了一种手段。在给定的电场下，在拓扑绝缘体的边界上会形成特定极化的自旋流。而对于给定了极化方向的自旋流，只能沿着特定的方向运动。这些性质不仅可以用来产生自旋流，还可以用来探测自旋流。这一点和自旋霍尔效应有点类似，后者本身可以用来产生自旋流，而其逆过程可以用来探测自旋流。Brüne 等人验证二维拓扑绝缘体 HgTe 量子阱的边界态的自旋极化

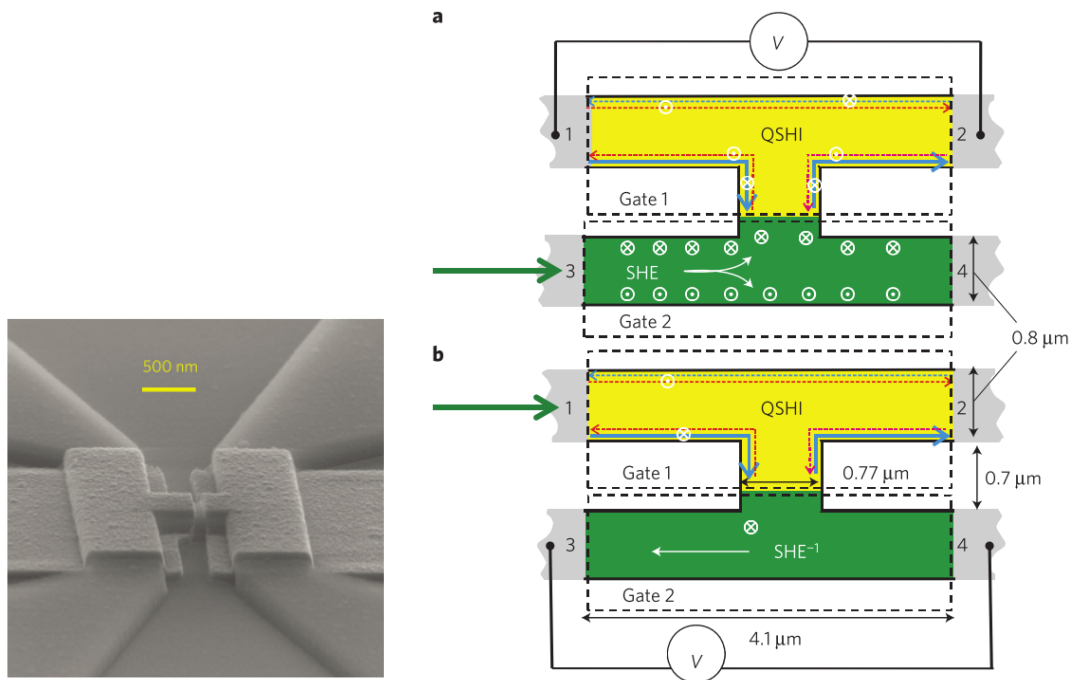
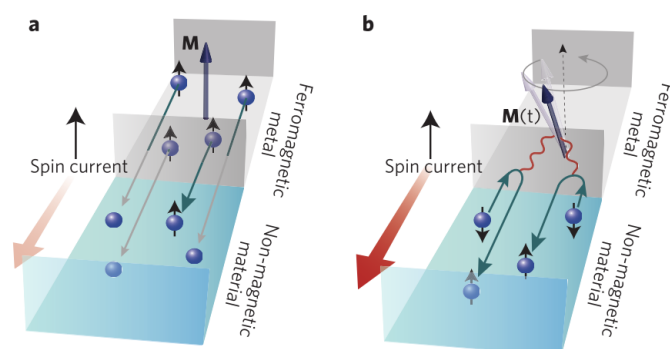


图 1-11: 左图: Brüne 等人的“H”型实验装置的电子显微镜图。右图: “H”构型下两个实验过程的示意图。黄色区域是量子自旋霍尔效应作用区域, 绿色部分是自旋霍尔效应作用区域。(a) 利用自旋霍尔效应产生自旋流, 然后用量子自旋霍尔效应探测自旋流。(b) 利用量子自旋霍尔效应产生自旋流, 然后用自旋霍尔效应探测自旋流。摘自文献 [171]。

性质的实验装置很好地同时利用了自旋霍尔效应和二维拓扑绝缘体里的量子自旋霍尔效应 [171]。在这里我们以该实验为例说明自旋霍尔效应和量子自旋霍尔效应的应用。在该实验中, Brüne 等人所采用的结构是“H”型的 HgTe 量子阱 (图 1-11 的左图), 但是“H”的两条“腿”所在的部分可以分别用门电压调控。在实验中一条腿的费米面比较高, 处在体态的金属区, 因而电子能体现出自旋霍尔效应 (图 1-11 右图的绿色区域); 而另一条腿的费米面比较低, 处在边界态上, 因而电子在量子自旋霍尔效应区 (图 1-11 的右图的黄色区域)。在图 1-11 右图 (a) 中, 电流在下面的腿中沿电极 3 向电极 4 注入, 由于自旋霍尔效应, 在横向会产生自旋流。当该自旋流进入到上面的量子自旋霍尔效应区域时, 只能沿着边界朝一个方向运动 (如图示的向电极 2 注入, 从电极 1 流回), 这时候在电极 1 和 2 之间就会产生电势差。在这种实验方案中, 自旋霍尔效应被用来产生自旋流, 而量子自旋霍尔效应被用来探测自旋流。在图 1-11 右图 (b) 中, 电流在上面的量子自旋霍尔效应区沿电极 1 向电极 2 注入, 这个电流只能沿着边界流动, 而且具有特定的自旋取向。当该自旋流进入到下面的自旋霍尔效应区时, 由于逆自旋霍尔效应, 会在电极 3 和 4 间产生电势差。在这种实验方案中, 量子自旋霍尔效应被用来产生自旋流, 而自旋霍尔效应被用来探测自旋流。

除了自旋霍尔效应和量子自旋霍尔效应, 利用空间对称性破缺下的自旋棘轮效应 (spin ratchet effect) [203–209], 以及磁场下量子点接触 (quantum point contact) 对自旋的选择性 [210], 也可以产生自旋流。此外, 铁磁材料中进动的磁矩也能向与其

接触的正常导体中泵浦注入纯的自旋流，该效应来自于局域电子的进动的自旋向巡游电子的自旋角动量的转移 [自旋转移矩效应（自旋极化的电流导致铁磁金属磁矩的偏转） [28–33] 的逆过程] [211]。基于这个效应，人们发展了名为动力学自旋泵浦（dynamical spin pumping）注入的方法（示意图见图 1-12 b） [40, 211–216]。和传统的涉及电荷跨界面运输的注入方法相比，这种泵浦注入的方式可以得到更大的自旋流，而且不受界面处电导不匹配的因素的限制 [212]。同时，利用这种方法注入的自旋流的大小还可以通过用偏压控制界面处的交换相互作用强度来调制 [212]。



**图 1-12:** a. 传统的利用电学方法通过铁磁电极向非磁性导体注入自旋极化的示意图。b. 利用动力学的自旋泵浦方法通过铁磁电极向非磁性导体注入纯的自旋流的示意图。铁磁电极和非磁性导体界面处的动态交换相互作用将铁磁材料中局域电子的自旋角动量传递给非磁性导体中的巡游电子。界面处非磁性导体中自旋极化的积累产生纯的自旋流。摘自文献 [212]。

另外，利用热效应也能实现自旋极化的注入。Breton 等人利用热的方法实现了从铁磁体到半导体 Si 中的自旋隧穿注入 [217]。如图 1-13 所示，铁磁体和 Si 处在不同的温度下，在 Si 中会产生自旋的积累，且自旋极化方向依赖于温度的梯度。这种热的自旋注入（或者与电的自旋注入结合在一起）有望提高自旋注入的效率。在图 1-1 右图中我们介绍对自旋热电势的测量装置时，由温度梯度在铁磁性材料里导致的自旋电压实际上也实现了对 Pt 电极的自旋流的注入 [37]。

### 1.3 自旋极化的探测

和自旋极化的产生相对应，自旋极化的探测也主要包括光学和电学方法。其中光学方法主要包括光致/电致发光、时间分辨的 Faraday 旋转和 Kerr 旋转测量。电学方法在传统上主要利用自旋阀结构通过磁阻效应来研究流的自旋极化。此外，泡利阻塞（Pauli blocking）、电子自旋共振（electron spin resonance）、Hanle 效应、逆自旋霍尔效应以及量子自旋霍尔效应都被广泛地结合到电学测量中。

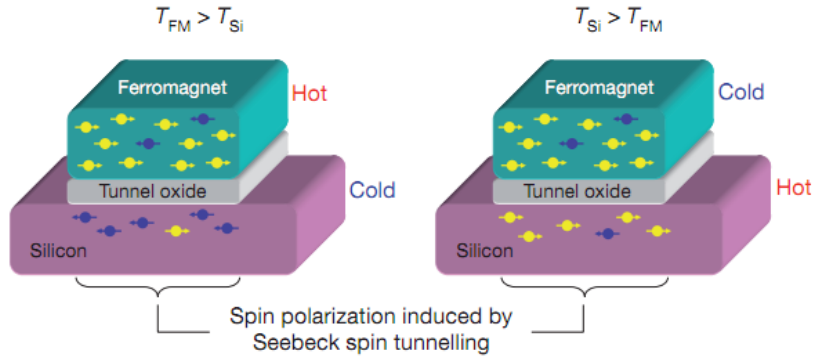


图 1-13: Si 上的铁磁隧穿结。Si 和铁磁体的温度差导致 Si 中的自旋积累，且自旋极化的方向与温度的梯度有关系。摘自文献 [217]。

### 1.3.1 光学测量

早期的光学测量采用光致发光方法 [1, 218–222]。从前面指出的光吸收过程的选择定则，可以知道，在相反的过程即电子空穴复合发光的过程中，载流子的自旋极化会反映到发光的偏振度中。测量发光的偏振极化度就可以知道载流子的自旋极化。例如，对于空穴自旋无极化的系统，根据图 1-8 所示的光学选择定则可以知道，发光的偏振极化度等于导带电子自旋极化度的一半。另外，如果施加横向的磁场使得电子自旋绕着磁场进动，那么考虑进自旋的弛豫，电子的自旋极化随时间的演化为  $P_0 e^{-t/\tau_s} \cos(\omega t)$ ，这里  $P_0$  是初始自旋极化度， $\tau_s$  是自旋弛豫时间， $\omega$  是磁场下的 Larmor 进动频率。根据电子自旋极化和发光极化度的关系，发光极化度也按照类似的规律变化。若电子被持续激发且不停地与空穴复合（复合时间为  $\tau_r$ ），则在这个磁场下，光致发光的稳定的极化度为

$$P(B) = \frac{\int_0^{+\infty} dt P_0 e^{-t/\tau_s} \cos(\omega t) e^{-t/\tau_r}}{\int_0^{+\infty} dt e^{-t/\tau_r}} = \frac{P(0)}{1 + \left(\frac{\omega \tau_r}{1 + \tau_r/\tau_s}\right)^2}, \quad (1.1)$$

其中  $P(0)$  是没有横向磁场时的发光极化度。由此可见，在横向磁场作用下，半导体带边发光的极化度会下降，此即 Hanle 效应 [1, 16, 223]。因此只要测得电子的寿命  $\tau_r$ ，再测量发光极化度随横向磁场的依赖，根据上面的方程就可以得到电子自旋弛豫时间  $\tau_s$ 。

在飞秒激光器技术发展以后，实验上广泛使用泵浦—探测（pump-probe）方法测量半导体中的自旋极化的时间演化。在该实验中，首先用圆偏振的泵浦激光激发自旋极化，在一个时间延迟  $\Delta t$  以后，再用强度相对弱很多的探测光去探测系统的自旋性质。探测方法主要有如下两种：(I) 利用圆偏振光探测左/右旋光的透射强度得到光学极化度，并进而得到自旋极化度。通过调节  $\Delta t$ ，可以得到自旋极化度随着时间的演化并进而得到自旋弛豫时间 [67, 224–226]。(II) 利用线偏光探测透射光/反射光的偏振方向的偏转角度，从而得知自旋极化的信息。在这种测量中，透射光/反射光的偏振方向的旋转

角度与电子的自旋极化度成正比。因而在不同时间点  $\Delta t$  进行测量可以得到自旋极化随时间的演化。这就是时间分辨的 Faraday/Kerr 旋转测量 [227]，分别对应于对探测光的透射/反射信号的观测。在施加横向磁场的情况下，Landau 有效  $g$  因子信息也可以被测量出。此外，用空间分辨的 Faraday/Kerr 旋转测量还可以研究自旋在空间的积累和输运性质 [228–232]。

注意到上面的泵浦—探测方法需要激发电子自旋（不管是泵浦光还是强度相对低的探测光）。事实上，无处不在的随机涨落过程本身就能产生自旋极化。利用这种随机涨落而不是泵浦光产生的自旋极化在横向磁场下做 Faraday 旋转测量，人们发展了名为自旋噪声谱（spin noise spectroscopy）测量 [233, 234] 的实验手段（实验装置见图 1-14 左图所示）。在这种实验方案中，对探测信号（Faraday 偏转角）的时间演化做傅立叶变换得到自旋噪声频谱（图 1-14 右图）。在该频谱中有一个峰，峰的位置对应横向磁场下的 Larmor 进动频率，峰的展宽则对应横向的自旋弛豫率。这一实验方案的优点是它几乎不产生光学激发，对系统的影响很小，因而能得到本征的自旋耗散信息。Crooker 等人通过这种方法测量了金属 Ru 中的自旋耗散信息 [233]，之后 Oestreich 等人把这一技术应用到 III-V 族半导体中 [235, 236]。关于该实验技术的基础和发展现状，可以参考评论文章 [234]。

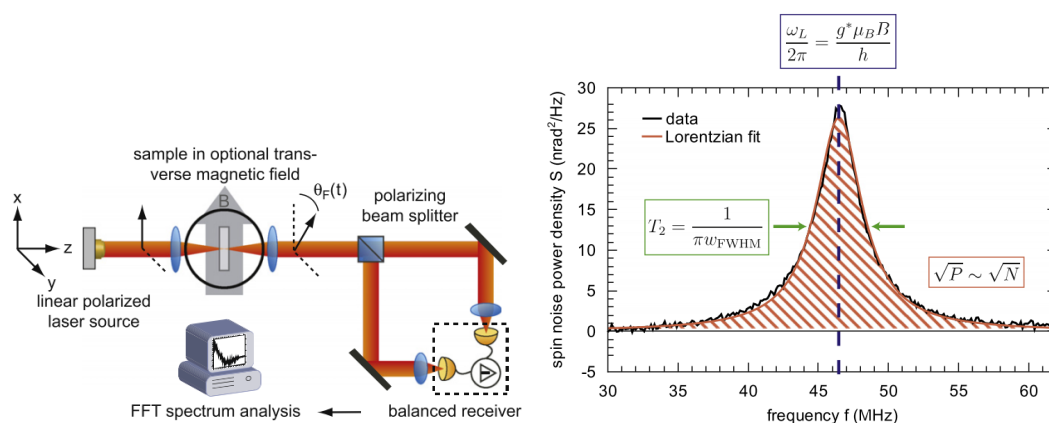
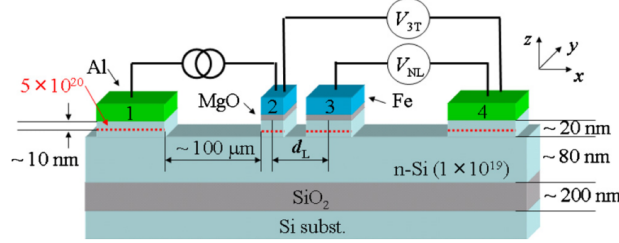


图 1-14: 左图：半导体中自旋噪声谱测量的基本实验装置。该装置和横向磁场下的 Faraday 旋转实验装置类似，只不过没有泵浦光源。右图：典型的自旋噪声谱信号。摘自文献 [234]。

### 1.3.2 电学测量

对自旋极化的电学测量中使用最广的手段基于自旋阀结构的磁阻效应，它是一种对输运信号的测量。和电学的自旋注入相对应，电学测量也分为局域的和非局域的测量。局域的测量对应于局域的自旋注入。它基于局域的自旋阀构型（图 1-9 左图），利用铁磁电极探测注入的自旋极化流。在这种构型下，可以通过外加磁场改变两个铁磁电极（注入端和探测端）磁矩的相对取向来测量电阻的变化，从而反映出通道中自旋极化的

性质。但是在这种测量中，电流和自旋极化流在同一个回路，使得局部电阻的涨落也会影响到电压的测量。



**图 1-15:** 非局域的自旋阀测量构型示意图。电极 2 和 3 是铁磁性的，电极 1 和 4 可以是铁磁的也可以是非铁磁的。电流经过电极 1 和 2 构成回路，在电极 2 下自旋的积累往右驱动产生纯的自旋流。如果用电极 3 和 4 探测电压信号，则是四端的非局域自旋阀测量。如果用 2 和 4 探测电压信号，则是三端的非局域自旋阀测量。摘自文献 [197]。

非局域的自旋流探测对应于非局域的自旋注入 [192–197]。我们以图 1-15 为示意进行说明。电极 1 和 2 参与的电流回路通过电极 2 向右侧进行非局域的自旋流注入。对该自旋流的非局域探测根据整个测量方案中所用到的电极数目（包括注入和探测所用到的）分为两种，分别称为四端非局域测量和三端非局域测量。在此我们仍旧以图 1-15 为示意，分别介绍如下。

- 四端非局域测量。这种测量方案涉及电极 1, 2, 3 和 4。远端的铁磁电极 3 和 4 可以对不同自旋的信号进行选择性的测量，其依据是这种非局域的电势差（或者电阻）与电极 3 下面载流子的自旋极化相关。这种四端的非局域测量可以采用两种方式进行。(I) 有一系列的电极 3 处在离电极 2 不同的位置，且磁矩方向与电极 2 平行。通过测量不同位置处的电极 3 和远端电极 4（电极 4 到电极 2 的距离一般远大于通道中自旋的扩散长度，因而它是否具有铁磁性已经影响不大）的电势差  $V_{NL}$ ，得到其对图示中  $d_L$  的依赖，进而由关系  $V_{NL} \propto e^{-d_L/L_s}$  得到自旋的扩散长度  $L_s$  [237–239]。(II) 另一种更常用的方式是外加垂直于铁磁电极磁矩方向（比如在图 1-15 中沿着  $z$  方向）的磁场，做 Hanle 效应的测量 [192, 194]。这种测量通过对  $V_{NL}$  关于磁场的依赖信号进行拟合得到扩散系数  $D$  和自旋弛豫时间  $\tau_s$ 。在这里，我们以图 1-15 为示意对这种 Hanle 效应测量作一下说明。我们假设铁磁电极 2 和 3 的磁矩平行且都沿着  $y$  方向，外加磁场  $\mathbf{B}$  沿着  $z$  方向。在电极 2 和 3 的磁矩平行的构型下，非局域的电势差  $V_{NL}$ （或者由其换算得到的非局域的电阻）正比于电极 3 下面的自旋极化度  $S(d_L)$ 。在运输的通道内，自旋的动力学可以用包含磁场导致的进动效应的扩散方程（见后面的章节 1.5.1）描述：

$$\partial_t \mathbf{S}(x, t) = D \partial_x^2 \mathbf{S}(x, t) + \omega \hat{\mathbf{e}}_z \times \mathbf{S}(x, t) - \mathbf{S}(x, t) / \tau_s, \quad (1.2)$$

这里  $\omega = g\mu_B B/\hbar$ 。该方程的解的  $y$  分量满足

$$S_y(x, t) \propto \int_0^t dt' \frac{1}{\sqrt{t'}} e^{-\frac{t'}{\tau_s} - \frac{x^2}{4Dt'}} \cos(\omega t'). \quad (1.3)$$

$V_{\text{NL}}$  正比于稳态时电极 3 下面的自旋极化度  $S_y(x = d_L, t = +\infty)$ ，因而

$$V_{\text{NL}} \propto \frac{\sqrt{\pi\tau_s}}{(1 + \omega^2\tau_s^2)^{1/4}} e^{-c_+d_L} \cos(c_-d_L + \theta), \quad (1.4)$$

其中  $c_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{D\tau_s}} \sqrt{\frac{\omega^2\tau_s^2 + 1 \pm 1}{2}}$ ， $\theta = \arctan \frac{\omega\tau_s}{\sqrt{\omega^2\tau_s^2 + 1} + 1}$ 。换一个角度，我们也可以直接在稳态下求解方程 (1.2)，即  $D\partial_x^2 \mathbf{S}(x) + \omega \hat{e}_z \times \mathbf{S}(x) - \mathbf{S}(x)/\tau_s = 0$ 。采用固定注入的自旋流的边界条件，即  $\partial_x \mathbf{S}(0) = j_{s0}(0, 1, 0)$  和  $\mathbf{S}(+\infty) = 0$ ，可以得到  $S_y(d_L) = -\frac{j_{s0}\sqrt{\tau_s}}{(1 + \omega^2\tau_s^2)^{1/4}} e^{-c_+d_L} \cos(c_-d_L + \theta)$  [8]。这个解和方程 (1.4) 是一致的，给出相同的  $\tau_s$  和  $D$  依赖<sup>①</sup>。实验上，人们用  $S_y(x = d_L, t = +\infty)$  的积分表达式 (1.3) 拟合实验测得的  $V_{\text{NL}}$  对  $B$  的依赖得到  $D$  和  $\tau_s$ 。进一步，人们得到无磁场情况下的自旋扩散长度  $L_s = 1/c_+(\omega = 0) = \sqrt{D\tau_s}$  [见方程 (1.32)]。作为例子，我们在图 1-16 的左图中给出了硅里面利用 Hanle 效应测得的非局域电阻对横向磁场的依赖曲线。

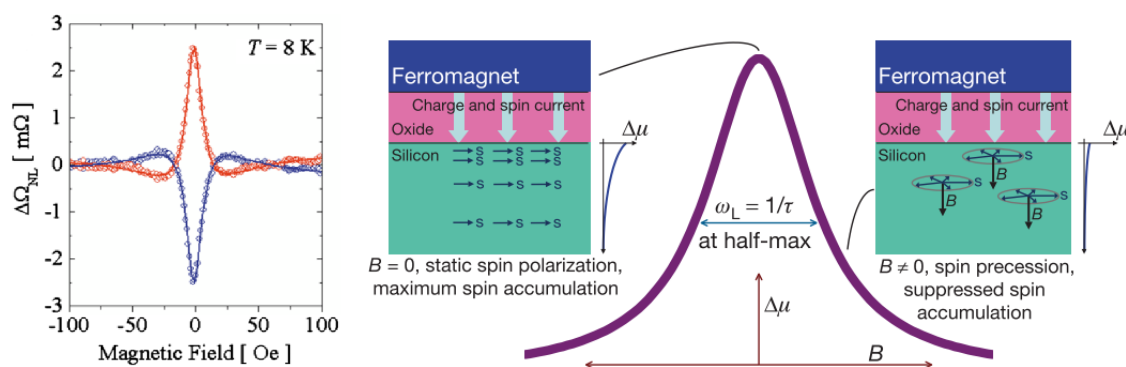


图 1-16: 左图: 在 Si 的四端非局域测量中, 利用 Hanle 效应测得的非局域电阻对横向磁场的依赖关系。点是实验数据, 实线是根据积分表达式 (1.3) 拟合的结果。红颜色的点和线是在电极 2 和 3 平行的构型下的结果, 蓝色的点和线是在电极 2 和 3 反平行的构型下的结果。摘自文献 [197]。右图: 三端非局域测量中局部的 Hanle 效应。在横向磁场下自旋的进动压制了自旋极化的积累。摘自文献 [240]。

- 三端非局域测量。这种测量方案涉及电极 1, 2 和 4, 测量的电压信号来自电极 2 和 4。在横向磁场的作用下 (比如沿着  $z$  轴), 电极 2 下面两种自旋的载流子的电势差近似满足和方程 (1.1) 类似的关系,  $\Delta\mu(B) = \Delta\mu(0)/(1 + \omega^2\tau_s^2)$  (不

<sup>①</sup>但是, 如果采用固定自旋极化的边界条件, 即  $\mathbf{S}(0) = S_0(0, 1, 0)$  和  $\mathbf{S}(+\infty) = 0$ , 我们有  $S_y(d_L) = S_0 e^{-c_+d_L} \cos(c_-d_L)$  [11]。哪种边界条件更接近实验的情况还有待进一步分析和研究。

同于前面介绍的光学测量手段，那里涉及光激发，因而有电子空穴复合的问题，但是这里的电子无复合）。在非局域的三端测量中，这个化学势差体现在电压  $V_{3T}$  上。从  $V_{3T}$  对  $B$  的依赖关系（见图 1-16 右图的示意曲线）可以得到自旋的弛豫时间。这里的 Hanle 效应类似于光学测量里的 Hanle 效应，体现的是局部电子自旋在磁场下的进动对自旋极化积累的压制，而不同于上面四端测量的输运过程中的 Hanle 效应。这也是有些文献称这种三端测量（以及前面的光学测量）里的 Hanle 效应为局域的 Hanle 效应（local Hanle effect） [232] 的原因。

除了自旋阀测量，对自旋极化或者自旋极化流还有其它的电学测量方法。逆自旋霍尔效应以及量子自旋霍尔效应也被应用于探测自旋流，在上小节中介绍产生自旋流的方案的时候（针对图 1-11 的讨论）已经一并举例介绍过。实验上对自旋弛豫的测量的典型手段还有电子自旋共振测量（electron spin resonance）或者又叫电子顺磁共振测量（electron paramagnetic resonance） [241–244]。此外，对于量子点系统，利用泡利阻塞效应探测点中的自旋信息也是一种常用的方法 [245]。

## 1.4 自旋的弛豫

在自旋电子学中，自旋的弛豫是使自旋从非平衡态回到平衡态的重要物理过程。这个过程的快慢决定自旋电子学器件的可行性。事实上，在金属、半导体以及石墨烯中，自旋弛豫时间可以达到百皮秒到纳秒的量级。对于原生的理想的石墨烯，在强度适中的门电压下，理论计算甚至给出微秒量级的自旋弛豫时间 [246, 247]。这些时间尺度使得自旋电子学在技术应用上成为可能。在这里，我们介绍如下几种主要的自旋弛豫机制：Elliott-Yafet（EY）机制 [248, 249]，D'yakonov-Perel'（DP）机制 [250]，Bir-Aronov-Pikus（BAP）机制 [251]，以及自旋轨道耦合在实空间的涨落产生的自旋翻转散射导致的自旋弛豫 [252]。这些机制以及其相对重要性在半导体中被比较多地研究。

### 1.4.1 Elliott-Yafet 自旋弛豫机制

Elliott 在 1954 年最早指出 [248]，晶格势场导致的电子自旋轨道耦合使得电子的波函数出现自旋的混合。在这种混合下，任何正常的自旋守恒散射（如电子—声子散射或者电子—杂质散射）都会导致电子自旋的弛豫。实际上，当电子在势场  $V(\mathbf{r})$  中以动量  $\mathbf{p}$  运动的时候，由于相对论效应，电子会感受到一个有效的磁场

$$H_{\text{so}} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.5)$$

其中  $m_0$  和  $c$  分别是自由电子的质量和真空的光速， $\boldsymbol{\sigma}$  是电子自旋的 Pauli 矩阵组成的矢量。 $V(\mathbf{r})$  是自旋无关的势场，包括周期性的晶格势的贡献，还可以包括外加的电



势。上面这个有效的磁场描述的就是自旋轨道耦合。考虑只有晶格势场而且材料具有体的对称中心（如 IV 族半导体 Si 等）的简单情况，能带  $n$  上具有动量  $\mathbf{k}$  的两个简并的电子 Bloch 态可以写为 [5, 248]

$$\psi_{\mathbf{k}n\uparrow}(\mathbf{r}) = [a_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})|\uparrow\rangle + b_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})|\downarrow\rangle]e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.6)$$

$$\psi_{\mathbf{k}n\downarrow}(\mathbf{r}) = [a_{-\mathbf{k}n}^*(\mathbf{r})|\downarrow\rangle - b_{-\mathbf{k}n}^*(\mathbf{r})|\uparrow\rangle]e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (1.7)$$

这两个 Bloch 态通过时间和空间的反演操作联系。 $|a_{\mathbf{k}n}|^2 + |b_{\mathbf{k}n}|^2 = 1$ 。在只考虑晶格周期势场的情况下， $H_{\text{so}}$  也具有晶格周期性，它导致了不同能带  $n$  上相同动量  $\mathbf{k}$  的 Bloch 态之间的耦合，如上面的方程所表明的。从微扰的角度出发有  $|b_{\mathbf{k}n}| \sim \lambda_{\text{so}}/\Delta E \ll 1$ 。这里  $\Delta E$  是不同能带间的能量差，而  $\lambda_{\text{so}}$  是  $H_{\text{so}}$  在带间的矩阵元。正因为  $|b_{\mathbf{k}n}| \ll 1$ ， $\psi_{\mathbf{k}n\uparrow}(\mathbf{r})$  仍近似是纯的自旋上的态， $\psi_{\mathbf{k}n\downarrow}(\mathbf{r})$  近似是纯的自旋下的态。但是此时动量守恒的散射会在这两个态间造成耦合，从而导致自旋的弛豫。这个自旋弛豫的速率与动量散射率成正比。

以上由于自旋轨道耦合产生的波函数混合导致的自旋弛豫过程被称为 Elliott 过程。此外，由于周期性离子实的势场贡献到电子的自旋轨道耦合，因而晶格的振动会导致声子和自旋的耦合，从而造成自旋翻转的散射。实际上，此时电声散射的矩阵元为  $g_{\mathbf{k}n\uparrow, \mathbf{k}'n'\downarrow}^\lambda = |\mathbf{u}_{\mathbf{q}\lambda} \cdot (\psi_{\mathbf{k}n\uparrow}, \nabla \tilde{V} \psi_{\mathbf{k}'n'\downarrow})|^2$ ，其中  $\mathbf{u}_{\mathbf{q}\lambda}$  是具有动量  $\mathbf{q}$  的  $\lambda$  支声子的位移矢量 [5]。这里  $\tilde{V} = V + V_{\text{so}}$ ，其中  $V_{\text{so}}$  部分导致自旋翻转的电声散射。这个效应最先由 Overhauser 在金属中讨论 [253]，之后由 Yafet 在具体的能带中研究 [254]。这个自旋弛豫过程称为 Yafet 过程 [249]。Elliott 和 Yafet 两种过程导致的自旋弛豫机制统称为 EY 机制。

对于闪锌矿半导体，电子的 EY 自旋弛豫机制可以从包含导带和价带的 Kane 哈密顿量（见章节 2.1.2）以及散射的微扰角度来理解 [1]。在闪锌矿半导体中，描述  $\Gamma$  点附近的  $\Gamma_6^c$  导带、 $\Gamma_8^v$  和  $\Gamma_7^v$  价带（见图 1-8 的左图）的  $8 \times 8$  Kane 哈密顿量 [1, 255] 具有如下形式（详见章节 2.1.2）：

$$H_{8 \times 8}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{6c6c}(\mathbf{k}) & H_{6c8v}(\mathbf{k}) & H_{6c7v}(\mathbf{k}) \\ H_{8v6c}(\mathbf{k}) & H_{8v8v}(\mathbf{k}) & H_{8v7v}(\mathbf{k}) \\ H_{7v6c}(\mathbf{k}) & H_{7v8v}(\mathbf{k}) & H_{7v7v}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

其中  $\mathbf{k}$  的各分量分别沿着 [100]，[010] 和 [001] 晶向。 $H_{6c6c}(\mathbf{k})$  在导带电子自旋  $|\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$  的基下是对角的，描述无耦合的两个自旋简并态。

虽然导带电子的两个自旋态之间没有直接的自旋翻转矩阵元，但是从二阶（对导带价带的关联来说）的微扰角度出发，长程作用可以贡献导带电子的自旋翻转矩阵元 [1]

$$H_{m'\mathbf{k}', m\mathbf{k}} = \sum_{ss'} \frac{H_{8 \times 8}^{m's'}(\mathbf{k}') H_{s'\mathbf{k}', s\mathbf{k}}^{\text{int}} H_{8 \times 8}^{sm}(\mathbf{k})}{(E_m - E_s)(E_m - E_{s'})}, \quad (1.9)$$

其中  $m$  和  $s$  分别标记导带和价带的态， $E_m$  和  $E_s$  代表能带在  $\Gamma$  点的能量位置。对于电子-杂质、电子-声子、电子-电子等长程作用， $H_{s'\mathbf{k}',s\mathbf{k}}^{\text{int}} = H_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{\text{int}}\delta_{s's}$ ，代表空穴带内的自旋守恒散射。只考虑 Kane 哈密顿量中  $H_{8\times 8}^{ms}(\mathbf{k})$  部分关于  $\mathbf{k}$  的线性项，可以计算得 [1]

$$H_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = H_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}^{\text{int}} \frac{i\hbar^2\eta(1-\eta/2)\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{k}'\times\mathbf{k})}{3m_eE_g(1-\eta/3)}. \quad (1.10)$$

其中  $\eta = \frac{\Delta_{\text{so}}}{E_g+\Delta_{\text{so}}}$ ， $m_e$  是导带电子的有效质量。在弹性散射近似下，利用费米黄金规则，可以得到长程作用导致的自旋弛豫速率为 [1]

$$\tau_{ks}^{-1} = \frac{16}{27} \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{E_g}\right)^2 \eta^2 \left(\frac{1-\eta/2}{1-\eta/3}\right)^2 \tau_k^{-1}. \quad (1.11)$$

其中  $E_{\mathbf{k}}$  是电子的动能， $\tau_k$  是动量弛豫时间。

考虑短程相互作用，比如电子与光学声子散射导致的导带和价带之间的直接跃迁，从一阶微扰的角度出发，导带电子的自旋翻转矩阵元为 [1]

$$H_{m'\mathbf{k}',m\mathbf{k}} = \sum_s \frac{H_{8\times 8}^{m's}(\mathbf{k}')H_{s\mathbf{k}',m\mathbf{k}}^{\text{int}} + H_{m'\mathbf{k}',s\mathbf{k}}^{\text{int}}H_{8\times 8}^{sm}(\mathbf{k})}{E_m - E_s}. \quad (1.12)$$

同样只考虑 Kane 哈密顿量中  $H_{8\times 8}^{ms}(\mathbf{k})$  部分关于  $\mathbf{k}$  的线性项，有 [1]

$$H_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = -\frac{1}{3} \frac{\eta\hbar d_2 \boldsymbol{\sigma}\cdot[\mathbf{U}\times(\mathbf{k}+\mathbf{k}')]}{[2m_eE_g(1-\eta/3)]^{1/2}}. \quad (1.13)$$

其中  $d_2$  是带间光学声子的形变势耦合常数， $\mathbf{U}$  是两套子格子的原子的相对位移。考虑纵向和横向的光学声子且认为它们的频率一样（记为  $\omega_{\text{LO}}$ ），则短程相互作用给出的自旋弛豫率为 [1]

$$\tau_{ks}^{-1} = \frac{16}{27} \frac{E_{\mathbf{k}}^2}{E_gE_0} \frac{\eta^2}{1-\eta/3} \tau_k^{-1}. \quad (1.14)$$

这里  $E_0 = \hbar^2e^2\omega_{\text{LO}}^2[4\pi\rho_0(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0})]/(4d_2m_e)$ ，其中  $\rho_0$  是材料密度， $\epsilon_0$  ( $\epsilon_\infty$ ) 是静态（高频）相对介电常数。这些解析结果确实表明，在 EY 机制下，半导体中电子的自旋弛豫时间和动量弛豫时间成正比，即  $\tau_s \propto \tau_p$ 。

EY 机制对 IV 族半导体中的自旋弛豫非常重要 [63, 256]。Cheng 等人在 EY 机制下系统的研究了 Si 中导带电子的自旋弛豫 [256]。他们发现，和实验观察到的 10-1000 ns 的自旋弛豫时间比起来，Elliott 和 Yafet 机制各自导致的自旋弛豫时间要小几个量级。但是，这两个过程会干涉相消，从而在很大的温度范围得到和实验值吻合很好的自旋弛豫时间 [256]。最近，Liu 等人对 Ge 中导带电子和声子的自旋依赖的散射做了

详尽的研究并考察了 EY 机制导致的自旋弛豫 [257]。

### 1.4.2 D'yakonov-Perel' 自旋弛豫机制

在有空间反演对称破缺的系统中，具有同样动量的自旋相反的电子态不再简并。这是因为时间反演对称性（如果有外加磁场，这个对称性也被破坏掉）仍要求  $E_{\mathbf{k}\uparrow} = E_{-\mathbf{k}\downarrow}$ ，但是缺乏了空间反演对称所导致的关系  $E_{\mathbf{k}\uparrow} = E_{-\mathbf{k}\uparrow}$ ，因而  $E_{\mathbf{k}\uparrow} = E_{\mathbf{k}\downarrow}$  无法保证。常见的 III-V 族和 II-VI 族半导体都具有体的反演对称破缺（bulk inversion asymmetry）的性质。此外，对于即使具有体的反演对称的材料如 IV 族半导体以及石墨烯，仍然可以通过外加约束（如形成量子阱或者异质结）或者外加电场导致结构上的反演对称破缺（structure inversion asymmetry）。

由于空间反演对称破缺导致的自旋劈裂可以通过引入动量依赖的有效磁场  $\Omega(\mathbf{k})$  来描述。描述电子自旋在这个有效磁场中的进动的哈密顿量为

$$H_{\text{so}}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2} \Omega(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (1.15)$$

由体的空间反演对称破缺贡献的这一项称为 Dresselhaus 自旋轨道耦合 [258]，由结构的空反演对称破缺（通常源于约束和外电场）贡献的这一项称为 Rashba 自旋轨道耦合 [66]。这个动量依赖的有效磁场导致电子系综的自旋进动在频率和方向上的不一致，也即非均匀扩展（inhomogeneous broadening）[11, 259]。在存在非均匀扩展的情况下，任何散射（包括库仑散射）都会导致不可逆的自旋弛豫。这种自旋弛豫机制称为 DP 机制 [1, 5, 11]。

从非均匀扩展的概念 [260–262] 出发可以对电子系综的自旋弛豫更全面深入地理解 [11, 259]。在空间均匀的体系中，除了上面提到的自旋轨道耦合导致的非均匀扩展，在有磁场的情况下能量依赖的  $g$  因子也会导致自旋进动的非均匀扩展 [263, 264]。在空间非均匀的体系中，实空间上的  $g$  因子涨落 [265, 266]、随机的自旋轨道耦合 [252, 267–271] 和非均匀的超精细相互作用 [272, 273] 等都可以提供非均匀扩展。此外，在空间非均匀系统的自旋扩散中，沿着空间梯度方向的自旋扩散速率对动量的依赖以及自旋轨道耦合对动量的依赖一起提供自旋在实空间进动的非均匀扩展 [11, 274–276]（见章节 1.5 和 4.3）。这种非均匀扩展是本征的，并非来自实空间的涨落和扰动。从非均匀扩展的概念出发理解自旋弛豫的核心是，在存在非均匀扩展的情况下，任何散射，包括自旋守恒的散射，特别是电子–电子库仑散射 [11, 277–280]，都会造成不可逆的自旋弛豫。这里散射有两个效应 [11, 281]。它一方面提供自旋弛豫的通道，另一方面抑制非均匀扩展。自旋弛豫所表现出的具体性质和散射与非均匀扩展的相对强度有关系。在弱散射区，散射主要提供自旋弛豫通道，因而自旋弛豫时间和动量弛豫时间成正比。但是，在强散射区，散射对非均匀扩展的抑制效应明显，从而使得自旋弛豫时间与动量散射时间成反比。在第 4 章，我们会基于动力学自旋 Bloch 方程 [11]，从解析上研究散射与非均匀扩展的关系以及两者的共同作用导致的自旋弛豫。

DP 自旋弛豫机制区别于 EY 自旋弛豫机制的一个重要特征是，在强散射区  $\langle |\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})| \rangle \tau_p \lesssim 1$ ，自旋弛豫时间和动量散射时间成反比，即  $\tau_s \propto \tau_p^{-1}$  [1, 5, 11]。这是因为在该区域，电子散射时间远远小于自旋的进动时间，使得自旋进动不能有效的发生，从而抑制由自旋进动导致的非均匀扩展。散射越强，这种抑制效应越明显，从而使得自旋弛豫时间变长。这个效应又被称为 motional narrowing 效应 [1, 5]。我们可以从随机行走的模型在图像上进行如下的了解 [1, 5]。电子在每两次散射之间的自旋进动角度为  $\delta\phi = |\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|\tau_p$ 。根据随机行走模型，在  $N = t/\tau_p$  次散射后，电子自旋偏离初态的角度的方差为  $\langle \Delta\phi(t)^2 \rangle = N\langle \delta\phi^2 \rangle$ 。电子自旋弛豫的时间由  $\langle \Delta\phi(t = \tau_s)^2 \rangle = 1$  给出，因而

$$\tau_s^{-1} = \langle \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})^2 \rangle \tau_p. \quad (1.16)$$

这就是文献中应用比较广范的描述强散射区 DP 机制下自旋弛豫的单体公式 [1]。另一方面，在  $\langle |\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})| \rangle \tau_p \gtrsim 1$  的弱散射区，DP 机制导致的自旋弛豫时间和动量弛豫时间成正比，即  $\tau_s \propto \tau_p$ 。这是因为在该区域，电子自旋能够进动完整的周期，在散射发生之前，电子系综的自旋极化可逆地衰减，这个衰减速率  $\sim \sqrt{\langle \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})^2 \rangle}$ ，决定于非均匀扩展。直到时间  $t \sim \tau_p$ ，随机的散射过程发生，提供自旋弛豫的通道，使自旋极化发生不可逆的弛豫。因而在弱散射区，不可逆的自旋弛豫时间  $\tau_s \sim \tau_p$ ，对非均匀扩展不敏感 [281–284]。

DP 与 EY 机制在强散射区域对动量散射截然相反的依赖常在实验上被用来区分哪种弛豫机制占主导，尤其是最近在石墨烯的自旋弛豫的研究中 [237, 238, 285–288]。在石墨烯中，一些实验用调节电子浓度的方法观察到了自旋弛豫时间  $\tau_s$  和动量弛豫时间  $\tau_p$  或者扩散系数  $D$ （在强简并的石墨烯中， $D = \frac{1}{2}v_f^2\tau_p$ ，这里  $v_f$  为线性能谱电子的费米速度）的线性关系 [237, 238, 285, 287]，并依此认为石墨烯中 EY 机制占主导。这种判定并不正确。因为在这些实验中，改变动量散射强度的时候费米面也被调节。而对于强简并的石墨烯，EY 机制给出  $\tau_s \propto k_f^2\tau_p$  [289, 290]，无法解释实验上在改变  $k_f$  的情况下观察到的  $\tau_s$  和  $\tau_p$  的线性关系。即使是对于具有抛物能谱的半导体，根据方程 (1.11) 和 (1.14)，在强简并情况下，也有  $\tau_s \propto k_f^{-4}\tau_p$ 。因而除非在改变电子动量散射的时候保持电子浓度、温度等其它可能会影响到  $\tau_s$  与  $\tau_p$  的比例系数的因素不变，否则 EY 机制下  $\tau_s$  和  $\tau_p$  没有理由一定满足线性关系。此外，即使是 DP 机制，在改变动量散射的时候如果其它量也随之变化，它也可能体现出  $\tau_s$  和  $\tau_p$  的线性关系，即类似 EY 机制的性质。以石墨烯为例，如果附着原子导致的 Rashba 自旋轨道耦合增强占主导，同时附着原子又作为库仑势散射中心影响动量散射，那么在强散射下， $\tau_s^{-1} = \langle \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})^2 \rangle \tau_p \propto n_a^2 \cdot n_a^{-1} \propto \tau_p^{-1}$  [291]，这里  $n_a$  是附着原子的浓度（在第 7 章，我们会具体研究有附着原子的石墨烯里的自旋弛豫，并对主导的弛豫机制做探讨）。最后，在有外加磁场  $\mathbf{B}$  时，在强散射区垂直于外加磁场的平面内的自旋弛豫满足  $\tau_s^{-1} = \langle \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})^2 \rangle \tau_p / (1 + \omega^2 \tau_p^2)$ ，这里  $\omega = g\mu_B B / \hbar$  [1]。当磁场很大以致于  $\omega \tau_p \gg 1$  时（在有效  $g$  因子大的材料比如 InAs 中这个条件容易满足）， $\tau_s^{-1} \approx \langle \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})^2 \rangle \omega^{-2} \tau_p^{-1}$ ，此

时 DP 机制也表现出类似 EY 机制的性质 [292]。总而言之，基于以上事实，应该认识到，在实验上不能简单的通过  $\tau_s$  和  $\tau_p$  的关系来判断是 EY 还是 DP 自旋弛豫机制占主导，而应该多方面考虑周全。

最后需要提到的是电子-电子库仑相互作用对 DP 机制下自旋弛豫的影响。首先，在早期对半导体的研究中，一种普遍的观点是，电子-电子库仑散射对电子的迁移率没有贡献，因而它不影响由迁移率得到的动量散射时间  $\tau_p$ ，从而对自旋的弛豫也没有影响。在 2000 年，Wu 等人最早指出载流子间的库仑散射对自旋弛豫有贡献 [264]。由于自旋进动随电子动量的改变而变化，因而任何影响动量态的散射—当然包括电子-电子库仑散射—都会导致自旋弛豫。两年之后，俄罗斯 Ioffe 所的 Ivchenko 组也指出并研究了类似的效应 [293]。Wu 等人系统地研究了电子-电子库仑散射对自旋弛豫的影响 [11, 246]。特别地，在高迁移率和本征型的量子阱中库仑散射往往占主导，对自旋弛豫的影响很大 [277–280]。实验的研究也证实了库仑散射对自旋弛豫的重要贡献 [294–299]。一个特别的现象是，从理论和实验上发现，在高迁移率低浓度的样品中，占主导作用的库仑散射在强度上对温度的非单调依赖导致了自旋弛豫时间在温度依赖上的一个峰，这个峰出现在从简并区到非简并区的过渡位置 [277, 294]。在自旋弛豫对浓度的依赖中，库仑散射的影响也被研究 [279, 300–306]。除了库仑散射，电子间的交换相互作用提供的库仑 Hartree-Fock 自能也会影响自旋的弛豫。该自能实质上相当于一个沿自旋极化方向的有效磁场。当自旋极化很大的时候，这个磁场可以达到很大并抑制自旋轨道耦合导致的自旋进动的非均匀扩展，从而抑制自旋弛豫 [11, 307]。该效应被 Weng 和 Wu 首先预言 [307]，并被实验所证实 [308–312]。

### 1.4.3 Bir-Aronov-Pikus 自旋弛豫机制

Bir, Aronov 和 Pikus 指出当体系中同时存在电子和空穴的时候，电子-空穴交换相互作用能导致电子的自旋弛豫 [251]。电子与轻、重空穴之间的交换相互作用（包括短程和长程的贡献）可以写成 [313]

$$H_{\text{ex}} = \frac{1}{V} \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} (\tilde{\mathcal{J}}_z(\mathbf{K}) \cdot S_z + \frac{1}{2} \tilde{\mathcal{J}}_- S_+ + \frac{1}{2} \tilde{\mathcal{J}}_+ S_-). \quad (1.17)$$

其中

$$\tilde{\mathcal{J}}_i(\mathbf{K}) = \pi a_b^3 \left[ \frac{3}{8} \Delta E_{\text{LT}} M_i(\mathbf{K}) - \frac{1}{2} \Delta E_{\text{SR}} J_i \right], \quad (1.18)$$

以及 [300, 313, 314]

$$M_z = \frac{1}{3K^2} \begin{pmatrix} -3K_{\parallel}^2 & 2\sqrt{3}K_zK_- & \sqrt{3}K_-^2 & 0 \\ 2\sqrt{3}K_zK_+ & (K_{\parallel}^2 - 4K_z^2) & -4K_zK_- & -\sqrt{3}K_-^2 \\ \sqrt{3}K_+^2 & -4K_zK_+ & (4K_z^2 - K_{\parallel}^2) & 2\sqrt{3}K_zK_- \\ 0 & -\sqrt{3}K_+^2 & 2\sqrt{3}K_zK_+ & 3K_{\parallel}^2 \end{pmatrix}, \quad (1.19)$$

$$M_- = M_+^\dagger = \frac{2}{3K^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}K_{\parallel}^2 & 2K_zK_- & K_-^2 & 0 \\ 2\sqrt{3}K_zK_+ & -4K_z^2 & -2K_zK_- & 0 \\ 3K_+^2 & -2\sqrt{3}K_zK_+ & -\sqrt{3}K_{\parallel}^2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.20)$$

这里  $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$  表示电子 1/2 自旋的升降算符,  $J_{\pm}$  表示空穴 3/2 自旋的升降算符。 $\mathbf{K}$  与  $\mathbf{K}'$  分别表示散射前后电子空穴对的总动量且  $K_{\parallel}^2 = K_x^2 + K_y^2$ ,  $K_{\pm} = K_x \pm iK_y$ 。  $a_b$  为玻尔半径。 $\Delta E_{\text{SR}}$  表示激子态的单三态劈裂, 是短程交换相互作用的特征能量, 而  $\Delta E_{\text{LT}}$  为纵向-横向劈裂, 对应长程交换相互作用的特征能量。

根据费米黄金规则, 由 BAP 机制导致的自旋弛豫时间为

$$\frac{1}{\tau_s(\mathbf{k})} = 4\pi \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}'m'm'} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'m'}^h - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}m}^h) |\langle \xi_{\mathbf{k}'m'} | \tilde{\mathcal{J}}_+(\mathbf{k} + \mathbf{k}') | \xi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}m} \rangle|^2 f_{\mathbf{k}'m'}^h (1 - f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}m}^h), \quad (1.21)$$

这里  $\varepsilon_{\mathbf{k}m}^h$  是动量为  $\mathbf{k}$ 、自旋为  $m$  的空穴的能量,  $|\xi_{\mathbf{k}m}\rangle$  为对应的空穴本征态, 而  $f_{\mathbf{k}m}^h$  为该带上的空穴分布。由于空穴的弛豫相较电子而言很快,  $f_{\mathbf{k}m}^h$  可以取为无自旋极化的平衡态分布。在 III-V 族体材料中, 如果只考虑重空穴带的贡献, 且只考虑短程相互作用, 那么在弹性散射近似下, 非简并的空穴系统贡献电子自旋的弛豫为  $\tau_s^{-1} = \frac{2}{\tau_0} n_h a_b^3 \frac{\langle v_{\mathbf{k}} \rangle}{v_b}$ , 简并的空穴系统贡献电子自旋的弛豫为  $\tau_s^{-1} = \frac{3}{\tau_0} n_h a_b^3 \frac{\langle v_{\mathbf{k}} \rangle}{v_b} \frac{k_B T}{E_f^h}$  [1]。其中  $1/\tau_0 = (3\pi/64)\Delta E_{\text{SR}}^2/E_b$ ,  $E_b$  是激子的 Bohr 能量,  $n_h$  是空穴浓度,  $\langle v_{\mathbf{k}} \rangle$  是电子的平均速度,  $v_b = 1/(m_R a_b)$  而  $m_R \approx m_e$  是电子-空穴对的折合质量,  $E_f^h$  是简并空穴系统的费米能。在这些公式中, 长程的电子-空穴交换相互作用没有考虑, 而 Jiang 等人的工作 [300] 表明在 III-V 族半导体中长程的交换相互作用很重要。在 GaAs 中, 他们发现长程的交换作用比短程的重要得多 [300]。另外, Zhou 和 Wu 基于完全微观的动力学自旋 Bloch 方程研究了  $p$  型和本征型的 GaAs 量子阱中低温和高激发浓度条件下电子自旋的弛豫, 他们发现弹性散射近似会丢失电子-空穴自旋翻转的库仑散射中的 Pauli 阻塞效应, 从而导致关于 BAP 机制对自旋弛豫的贡献的过高估计 [278]。

注意到上面给出的电子空穴之间的交换相互作用没有考虑自旋劈裂带。在自旋轨道劈裂能大的材料中这种处理是合理的, 绝大部分文献也是这样做的。但是, 对于自旋轨道劈裂能小的材料 (比如, GaN 的自旋轨道劈裂能比带隙小很多), 自旋劈裂带的贡献有可能会变得重要。最近, Tong 和 Wu 将导带、轻重空穴带和自旋劈裂带都考虑进



### 1.4.4 自旋轨道耦合的随机涨落导致的自旋弛豫

前面介绍 DP 自旋弛豫机制时指出，在空间反演对称性破缺的时候，电子会感受到来自 Dresselhaus 或者 Rashba 自旋轨道耦合的有效磁场。这种有效磁场通常对时空无依赖的，它对动量的依赖提供自旋进动的非均匀扩展。但是，实际上，由于自旋轨道耦合依赖于材料和结构，系统中任何一点随机的涨落都有可能在局部造成自旋轨道耦合的变化，从而导致自旋轨道耦合的随机性。这种时间上或者空间上随机变化的有效磁场也会提供自旋进动的非均匀扩展，从而贡献自旋的弛豫。

随机的自旋轨道耦合有如下几种常见的来源。电离的杂质的库仑势可以贡献随机的 Rashba 自旋轨道耦合 [247, 267, 268]，在量子阱中阱宽的随机变化（阱宽不可能严格一致）也会导致依赖于阱宽的自旋轨道耦合的随机变化。在石墨烯中，表面随机的附着原子可以局部的增强 Rashba 自旋轨道耦合，石墨烯本身在结构上的涨落也可以局部的改变自旋轨道耦合 [269, 315–319]。此外，Sherman 指出，在多层量子阱结构中，电子—电子库仑散射也是导致时间上随机的自旋轨道耦合的来源。其物理图像是，一层量子阱中电子和另一层量子阱中的电子发生库仑散射时，每一层量子阱中电子的运动都会引起另一层中电子所感受到的 Rashba 自旋轨道耦合的变化，从而使后者产生随机的自旋进动 [252, 320, 321]。

随机的自旋轨道耦合对自旋弛豫的具体影响决定于其关联长度  $\xi$  和电子的平均自由程  $l$  的相对大小。下面我们针对  $\xi \ll l$  和  $\xi \gg l$  的两种情形分别进行讨论。

在  $\xi \ll l$  的情况下，随机涨落的自旋轨道耦合作为运动的电子能够切实感受到的自旋依赖的空间势，会导致自旋翻转散射，从而贡献自旋的弛豫。这个效应是 Sherman 等人指出来的 [252, 267–270]。我们在此从半经典的角度（这时要求  $k_f \xi \gg 1$ ）基于随机行走的模型初步了解这种自旋翻转散射导致的自旋弛豫。虽然以速度  $v$  运动的电子穿过多个线度为  $\xi$  的具有不同自旋轨道耦合强度的区域后才经历一次动量散射，但是由于不同区域的自旋轨道耦合强度不同，在跨越不同区域时自旋的进动方式也会发生改变。电子穿过一个区域所用的时间为  $\delta t = \frac{\xi}{v}$ ，自旋进动的角度为  $\delta \phi = |\mathbf{\Omega}(\mathbf{r}, \mathbf{k})| \delta t$ ，在经过  $N = t/\delta t$  个区域后电子自旋偏离初始方向的方差为  $\langle \Delta \phi(t)^2 \rangle = N \langle \delta \phi^2 \rangle$ 。自旋弛豫时间由  $\langle \Delta \phi(t = \tau_s)^2 \rangle = 1$  给出， $\tau_s^{-1} = \langle \mathbf{\Omega}(\mathbf{r}, \mathbf{k})^2 \rangle \xi / v$ 。和 DP 机制下强散射区的自旋弛豫不同的是，这里  $\tau_s$  与电子穿过一个自旋轨道耦合区域所用的时间  $\xi/v$ （而非动量散射时间  $\tau_p$ ）成反比。另外， $\langle \mathbf{\Omega}(\mathbf{r}, \mathbf{k})^2 \rangle$  不仅包括对动量的平均，还包括对空间的平均。对于  $\mathbf{\Omega}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \lambda(\mathbf{r}) \mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$  的情形， $\tau_s^{-1} = \langle \lambda(\mathbf{r})^2 \rangle \langle \mathbf{\Omega}(\mathbf{k})^2 \rangle \xi / v$ 。

我们进一步在一般的情况下（不限于半经典情形）以随机电场（例如来自电离的杂质）导致的随机 Rashba 场为例简要说明随机自旋轨道耦合导致的自旋翻转散射以及它对自旋弛豫的贡献 [252, 270]。随机的 Rashba 场可以写为

$$H_{\text{so}} = -\frac{i}{2} \sigma_x \{ \nabla_y, \lambda(\mathbf{r}) \} + \frac{i}{2} \sigma_y \{ \nabla_x, \lambda(\mathbf{r}) \}, \quad (1.25)$$



其中  $\lambda(\mathbf{r})$  具有零期望值  $\langle \lambda(\mathbf{r}) \rangle = 0$  和关联函数  $\langle \lambda(\mathbf{r})\lambda(\mathbf{r}') \rangle = C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 。动能部分  $H_0 = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*}$  的本征态为  $\phi_{\mathbf{k}\sigma} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|\sigma\rangle$ 。  $H_{\text{so}}$  在这些本征态间的矩阵元为  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma\sigma'} = \langle \phi_{\mathbf{k}\sigma} | H_{\text{so}} | \phi_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle = \frac{\lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}}{2} \langle \sigma | \sigma_x(k_y + k'_y) - \sigma_y(k_x + k'_x) | \sigma' \rangle$ ，其中  $\lambda_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r} \lambda(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ 。  $H_{\text{so}}$  贡献自旋翻转的散射到电子的运动方程，  $\partial_t \rho_{\mathbf{k}} = \partial_t \rho_{\mathbf{k}}|_{\text{scat}}^f$  [252, 270]，其中

$$\partial_t \rho_{\mathbf{k}}|_{\text{scat}}^f = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} (2V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} - V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (1.26)$$

这里  $\rho_{\mathbf{k}}$  是电子在自旋空间的  $2 \times 2$  的密度矩阵，  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m^*$  是电子动能。假设  $\rho_{\mathbf{k}} = \rho_{\mathbf{k}}^0 + S_{\mathbf{k}}^z \sigma_z$ ，即自旋沿着  $z$  方向极化，由上面的自旋翻转散射项可以得到自旋在该方向的弛豫率为  $1/\tau_k^s = \frac{m^*}{4\pi} \int_0^{2k} C(\mathbf{q})(4k^2 - q^2)^{1/2} dq$  [270]，这里  $C(\mathbf{q})$  是  $C(\mathbf{r})$  的 Fourier 变换。需要指出的是，如果随机的自旋轨道耦合场的平均值非零，即  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma\sigma'} \neq 0$ （这里要求  $\lambda_{\mathbf{q}=0} \neq 0$ ），则这个平均的自旋轨道耦合场会贡献到相干的进动项里，相应的运动方程为  $\partial_t \rho_{\mathbf{k}} + \frac{i}{\hbar} [V_{\mathbf{k}\mathbf{k}}, \rho_{\mathbf{k}}] = \partial_t \rho_{\mathbf{k}}|_{\text{scat}}^f + \partial_t \rho_{\mathbf{k}}|_{\text{scat}}^c$ 。这时进动项和散射项还会在 DP 机制下导致自旋弛豫。在第 7 章，我们会在石墨烯中，具体地从解析和数值上研究由衬底和附着原子导致的平均值非零的随机 Rashba 场下的自旋弛豫。

最后，对于  $\xi \gg l$  的情况，电子的自旋弛豫由局域的自旋轨道耦合通过 DP 机制支配 [271, 284]，上面提到的在  $\xi \ll l$  的情况下自旋轨道耦合的空间涨落导致的自旋翻转散射不存在。在这种情形下，空间局域的自旋轨道耦合实际上提供了实空间上的一种非均匀扩展，大面积样品内的自旋弛豫由空间上各局部区域内的电子的自旋动力学行为的相干叠加决定 [271]。在章节 7.2 中，我们会在具有大尺度波纹状起伏的石墨烯中研究这种局域的自旋轨道耦合支配下的自旋弛豫。

### 1.4.5 主要的自旋弛豫机制的比较

除了前面列举的几种主要的自旋弛豫机制，还有其它一些导致自旋弛豫的机制。比如，超精细相互作用（电子和核自旋之间的磁相互作用）对束缚电子（如量子点系统中）的自旋弛豫有很重要的影响 [1]。理解不同条件（如温度、载流子浓度和光激发强度等）下各种自旋弛豫机制的相对重要性对实验研究和实际应用都很重要。下面我们将不同情况下各种自旋弛豫机制的相对重要性简要总结如下：

- 对于 III-V 族  $n$  型或者本征型半导体的体结构中的导带电子，通常是 DP 机制重要。哪怕是在窄带半导体中，EY 机制也没有 DP 机制重要 [300, 323]。对于 III-V 族  $p$  型半导体体材料中的导带电子，Jiang 和 Wu 发现，在低的激发浓度下，在低温下 BAP 机制的贡献会超过 DP 机制的贡献，并且掺杂浓度越高，BAP 机制占主导的温度、激发浓度区域就越大 [300]。但是，在高的激发浓度下，受到 Pauli 阻塞效应的影响，BAP 机制会被抑制。这种情况下，在高温和低温下 BAP 机制都不重要，只有在适中的温度下（电子费米温度附近）BAP 机制才和 DP 机制可比 [300]。

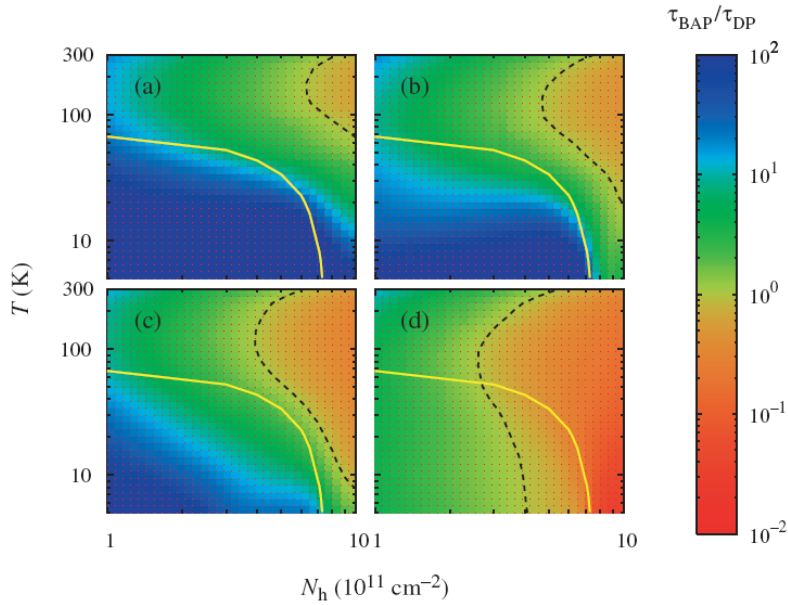


图 1-17: 在  $p$  型 GaAs 量子阱中, BAP 与 DP 机制导致的电子的自旋弛豫时间的比值,  $\tau_{BAP}/\tau_{DP}$ , 随温度  $T$  以及空穴浓度  $N_h$  的变化关系。(a) 杂质浓度  $N_i = 0$ , 电子-空穴激发浓度为  $N_{ex} = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ; (b)  $N_i = 0$ ,  $N_{ex} = 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ; (c)  $N_i = N_h$ ,  $N_{ex} = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ; (d)  $N_i = N_h$ ,  $N_{ex} = 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 。黑色短划线表示  $\tau_{BAP}/\tau_{DP} = 1$ 。黄色实线表示空穴多子带效应的相对重要性, 在该线以上的区域, 多子带效应不能忽略。摘自文献 [322]。

- 对于 III-V 族  $n$  型或者本征型半导体的量子阱结构中的导带电子, 通常是 DP 机制主导; 而对 III-V 族  $p$  型半导体的量子阱结构中的导带电子, 则和上面提到的体的情形类似, 在个别情况下 BAP 机制会很重要甚至超过 DP 机制。Zhou 和 Wu 研究了本征和  $p$  型 GaAs 量子阱中 DP 和 BAP 机制下的导带电子的自旋弛豫。他们发现, BAP 机制通常可以忽略, 但是在大阱宽、高温和高空穴浓度的情况下 BAP 能够和 DP 机制相比 [278]。进一步, Zhou 等人 [322] 在  $p$  型 GaAs 量子阱中讨论了掺杂浓度、温度以及激发浓度变化过程中 BAP 与 DP 机制的相对重要性 (见图 1-17)。他们发现, 在相对低的温度和空穴浓度范围内, DP 机制占主导。但是, 在高温高空穴浓度时, BAP 机制的贡献可以超过 DP 机制的贡献 [322, 324] (见图 1-17 中短划线右侧的区域)。在激发浓度很低和/或有很高的杂质浓度时, BAP 机制在更大的温度、空穴浓度范围内都比 DP 机制重要。
- 对于 III-V 族半导体体结构中的价带空穴, 由于价带中轻重空穴强的自旋混合, EY 机制可以比 DP 机制要重要得多 [325]。然而, 对于 III-V 族半导体量子阱结构中的价带空穴, 由于子带间的能量劈裂减弱了空穴带自旋的混合, DP 机制会占主导 [281, 326]。但是在 DP 机制被强烈抑制的特殊情况下 (比如特定的门电压导致自旋轨道耦合的减弱), EY 机制会显现出效应 [326]。
- 对于 III-V 族半导体的一些特殊构型下特殊方向上的自旋弛豫, DP 机制会被抑制或者消失。这时候其它自旋弛豫机制会有重要贡献或者完全主导。比如, 在对称的 (110) GaAs 量子阱中, 由于 Dresselhaus 自旋轨道耦合提供的有效磁场沿着阱

的生长方向，因此在最低子带占据下，沿着阱的生长方向没有 DP 机制导致的自旋弛豫。对于本征激发的情形，Ohno 等人观察到了沿着阱的生长方向的长达几个纳秒的电子的自旋弛豫时间，并且认为这个有限的自旋弛豫时间是由 BAP 机制导致的 [224]。Müller 等人在  $n$  型的 (110) GaAs 量子阱中测得沿着阱的生长方向的长达几十纳秒的自旋弛豫时间并认为这个有限的自旋弛豫时间是平面内的随机 Rashba 场造成的 [236]。这种猜测后来被 Zhou 和 Wu 从完全微观的动力学自旋 Bloch 方程出发的理论计算所验证 [271]。他们认为，局部的涨落导致的 Rashba 场下 DP 机制支配的自旋动力学过程的相干叠加决定了整个样品大面积内的自旋系综的自旋弛豫。但是 Zhou 和 Wu 同时也指出，对于这种体系，虚的带间散射协同带间的自旋轨道耦合也是导致自旋弛豫的一种可能机制 [327]，它在迁移率足够低的样品中会很重要 [327]。

- 对于 IV 族半导体如 Si、Ge 的体结构中，由于空间反演对称性，DP 自旋弛豫机制消失，这时候 EY 机制占主导 [256]。对于 IV 族半导体的量子阱结构，如果量子阱是对称的，则 DP 机制仍然不存在。但是，如果量子阱是非对称的，则会引入 Rashba 型的自旋轨道耦合 [301,328]，DP 机制可以主导自旋的弛豫 [301,329]。
- 在具有随机涨落的自旋轨道耦合的系统中，如果电子的平均自由程远大于随机涨落的关联长度，则随机自旋轨道耦合的涨落导致的自旋翻转散射才会存在并贡献自旋的弛豫。在空间上平均的自旋轨道耦合很小或者为零的时候（比如对称的 Si 量子阱中 [268]，以及无外电场的上下起伏的石墨烯中 [269]），这种随机的自旋轨道耦合导致的自旋翻转散射对自旋弛豫的贡献变得重要。在章节 7.1 中，我们会研究存在附着原子导致的随机的 Rashba 自旋轨道耦合的情况下石墨烯中的自旋弛豫。我们会发现，在双侧（石墨烯的上下两个表面）都有随机的附着原子的时候，空间平均的 Rashba 自旋轨道耦合可以很小甚至消失，这时候随机自旋轨道耦合的涨落导致的自旋翻转散射会变得重要。但是，仅仅在单侧存在附着原子的时候，DP 自旋弛豫机制占主导 [291]。

## 1.5 自旋的输运

和电荷类似，空间上非平衡的自旋分布也可以在实空间扩散或者在电场的作用下漂移。与自旋的弛豫一样，了解自旋的这种输运性质对于自旋电子学器件的实现同样非常重要。最显而易见的，Datta-Das 场效应晶体管的具体实现就需要对具体材料中自旋输运的清晰认识。

### 1.5.1 漂移—扩散模型

自旋的输运在金属中很早就开始研究。一个广泛采用的模型就是两分量的漂移—扩散模型 [8, 11, 186, 330, 331]。该模型也被应用到对半导体的自旋输运的研究。在线性区，

对应于两个自旋分量的流为

$$\mathbf{j}_\eta = \sigma_\eta \mathbf{E} + eD_\eta \nabla n_\eta, \quad (1.27)$$

其中  $\sigma_\eta$  和  $D_\eta$  是自旋  $\eta = \pm\frac{1}{2}$  依赖的电导和扩散系数,  $n_\eta$  是自旋  $\eta$  的电子浓度。  $\sigma_\eta = n_\eta e \mu_\eta$ ,  $\mu_\eta$  是迁移率。我们假设迁移率和扩散系数对自旋的依赖很弱, 即  $\mu_{\frac{1}{2}} = \mu_{-\frac{1}{2}} = \mu$  和  $D_{\frac{1}{2}} = D_{-\frac{1}{2}} = D$ 。利用连续性条件并采用自旋弛豫时间近似, 有

$$\frac{\partial n_\eta}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{j}_\eta - \frac{n_\eta - n_{-\eta}}{2\tau_s}. \quad (1.28)$$

由上面两个方程可以得到

$$\frac{\partial n_\eta}{\partial t} = \mu \mathbf{E} \cdot \nabla n_\eta + D \nabla^2 n_\eta - \frac{n_\eta - n_{-\eta}}{2\tau_s}, \quad (1.29)$$

进而有

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} = \mu \mathbf{E} \cdot \nabla \delta n + D \nabla^2 \delta n - \frac{\delta n}{\tau_s}, \quad (1.30)$$

其中  $\delta n = n_{\frac{1}{2}} - n_{-\frac{1}{2}}$ , 描述两种自旋的载流子的非平衡。我们考虑沿着  $x$  方向的输运情形。在稳态下, 取边界条件  $\delta n(x = +\infty) = 0$ , 上面的方程有解  $\delta n(x) = \delta n(0) e^{-x/l_s}$ 。其中自旋输运长度 [11, 330]

$$l_s = \left[ \frac{\mu E}{2D} + \sqrt{\left(\frac{\mu E}{2D}\right)^2 + \frac{1}{D\tau_s}} \right]^{-1}. \quad (1.31)$$

在没有外电场的情况下,

$$l_s = \sqrt{D\tau_s}, \quad (1.32)$$

这是在文献中广为采用的计算自旋扩散长度的公式 [8, 58, 59, 330]。

在有外磁场的情况下, 考虑任意的自旋极化方向以及自旋极化在磁场下的进动, 上面的漂移扩散模型 [方程 (1.30)] 写为 [8, 11]

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = \mu \mathbf{E} \cdot \nabla \mathbf{S} + D \nabla^2 \mathbf{S} - \frac{\mathbf{S}}{\tau_s} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{S}, \quad (1.33)$$

其中  $\boldsymbol{\omega} = g\mu_B \mathbf{B}/\hbar$ 。这里  $\mathbf{S}$  为自旋极化矢量。在前面介绍 Hanle 效应测量自旋输运的时候我们已经给出了在没有外加电场时上面的方程所对应的形式 [方程 (1.2)] 并给出了稳态的解。有电场的情况下基于上述方程对 Hanle 效应的研究, 可以参考文

献 [8] 和 [11]。

### 1.5.2 基于动力学自旋 Bloch 方程的微观理解

两分量的漂移-扩散模型采用了自旋弛豫时间近似，因而没有考虑进自旋轨道耦合的有效磁场导致的自旋进动。实际上，即使没有外加磁场，在有自旋轨道耦合的情况下，自旋在实空间的输运过程中也可能会发生进动，因而使得自旋相干变得重要。在这种情况下，漂移-扩散模型不能很好的描述自旋的输运。另外，漂移-扩散模型还涉及需要额外提供的参数（或测量或另外计算得到），如扩散系数、迁移率和自旋弛豫时间等。基于动力学自旋 Bloch 方程方法 [11]，可以从完全微观的角度对自旋的输运进行了解，而且可以研究远离平衡的情形。

前面我们已经指出，在时间域里，自旋进动由来自于自旋轨道耦合的有效磁场  $\Omega(\mathbf{k})$  决定。 $\Omega(\mathbf{k})$  对动量的依赖提供非均匀扩展。但是，在空间域的自旋输运过程中（假设输运方向沿着  $x$  方向），自旋在空间的进动频率由（详见章节 4.3）

$$\omega_{\mathbf{k}} = \frac{2\Omega(\mathbf{k})}{\partial_{k_x}\varepsilon_{\mathbf{k}}} \quad (1.34)$$

决定 [11, 274–276]。 $\omega_{\mathbf{k}}$  对动量的依赖导致输运过程中的非均匀扩展。时间域和空间域里的非均匀扩展很不一样。此外，即使没有 Dresselhaus 或者 Rashba 型的自旋轨道耦合，也即在时间域里没有 DP 弛豫机制，如果有外加静磁场，自旋在空间的进动频率

$$\omega_{\mathbf{k}} = \frac{g\mu_B\mathbf{B}}{\partial_{k_x}\varepsilon_{\mathbf{k}}} \quad (1.35)$$

也会由分母上的  $\partial_{k_x}\varepsilon_{\mathbf{k}}$  对动量的依赖给出输运过程中的非均匀扩展。在散射的作用下，自旋在输运的过程中也会不可逆的弛豫。这个性质最早由 Weng 和 Wu 在 2002 年指出 [274]。在第 6 章，我们会具体的在对称的 Si/SiGe 量子阱中研究没有 DP 自旋弛豫机制时静磁场导致的输运过程中的自旋弛豫 [332]。

## 第二章 半导体、石墨烯、拓扑绝缘体和多铁氧化物的能带结构与有效哈密顿量

在这一章，我们从能带结构和有效哈密顿量上对半导体、石墨烯、拓扑绝缘体和多铁氧化物中的二维电子系统分别进行简要的介绍。对于研究电子有效哈密顿量的一些常用手段，比如  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  方法、紧束缚近似方法以及不变量方法，在本章中都有所介绍和应用。

### 2.1 半导体

在晶体中，价电子在晶格势中做公有化运动。由于离子实的振动，晶格势其实是依赖于时间的。此外，电子和电子之间还有库仑相互作用。这些因素对关于价电子行为的描述造成了困难。在绝热近似（关注电子体系的运动时认为离子实固定在其瞬时位置上）、单电子近似（用平均场替代其它所有电子的影响）以及周期场近似（认为平均场具有和晶格势一样的周期性）下，可以得到单电子的薛定谔方程

$$\left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

其中  $V(\mathbf{r})$  是周期性的单电子势，而

$$H_{\text{so}} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.2)$$

是在章节 1.4.1 中提到过的电子在势场中运动时的自旋轨道耦合。

#### 2.1.1 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法

根据 Bloch 定理，周期性势场中的电子波函数为由动量  $\mathbf{k}$  标记的 Bloch 态

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

其中  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i)$ ， $\mathbf{R}_i$  为周期性排列的离子实的位置。在考虑了自旋轨道耦合后， $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  其实是自旋空间的两分量旋量。将该波函数代入单电子薛定谔方程 (2.1)，可

以得到  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  方程

$$H_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

其中  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量 [333]

$$H_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}, \quad (2.5)$$

而  $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})$ 。对每一个参数  $\mathbf{k}$ ，方程 (2.4) 在周期性条件  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i)$  下具有分立的本征解。这些不同的解对应不同的能带，用  $n$  标记。因而，Bloch 电子的状态由两个量子数  $n$  和  $\mathbf{k}$  标记，相应的能量和波函数分别记为  $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$  和  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 。

在常见的材料中，电子所占据的带边位于布里渊区的高对称点附近，比如其中心  $\Gamma$  点， $\mathbf{k} = 0$  处。因此， $u_{n\mathbf{k}}$  可以用其在该高对称点处的有限几个能带上的对应形式展开， $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{n\nu\sigma}(\mathbf{k})u_{\nu 0}(\mathbf{r})|\sigma\rangle$ ，其中标量函数  $u_{\nu 0}(\mathbf{r})$  满足方程  $[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r})]u_{\nu 0}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\nu 0}u_{\nu 0}(\mathbf{r})$ 。这种展开本质上就是选取  $\{u_{\nu 0}(\mathbf{r})|\sigma\rangle\}$  为基。在这组基下得到  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量的具体矩阵表达式并严格对角化，就可以得到在高对称点附近的能带结构。所取的基的数目越多，得到的能带结构在更大的动量范围内也越准确。注意到  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量中的自旋相关的部分包括两项，

$$H_{\mathbf{k}}^{\text{so}}(\mathbf{p}) = \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{k} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}, \quad (2.6)$$

通常来说第一项远远小于第二项，因而常被忽略 [333]。事实上，正是第二项导致在高对称点处简并态的劈裂。比如，在下一节我们会看到，对于闪锌矿半导体如 GaAs 和 Si，在不考虑自旋轨道耦合时，在  $\Gamma$  点处最高价带是六重简并的。但是考虑自旋轨道耦合后，上面第二项的作用使得六重简并态劈裂为一个四重简并的子空间（轻、重空穴带）和一个两重简并的子空间（自旋劈裂带）。

### 2.1.2 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 哈密顿量：Kane 模型

常见的 III-V 族半导体材料如 GaAs 以及 IV 族半导体材料如 Si，具有闪锌矿晶格结构。III-V 族半导体没有反演对称中心，但是 IV 族半导体具有反演对称中心。前者的点对称操作构成  $T_d$  群，而后者属于  $O_h$  群 ( $O_h = T_d \otimes C_i$ ,  $C_i$  是空间反演操作)。下面我们以闪锌矿 III-V 族半导体为例介绍 Kane 模型下描述多带的  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量，然后将该哈密顿量约化到有限数目的带构成的子空间里（比如最低导带），得到描述这个子空间的有效哈密顿量，包括有效的自旋轨道耦合。

在具有  $T_d$  群对称性的闪锌矿 III-V 族半导体中，电子的低能占据态位于布里渊区中心的  $\Gamma$  点。在该对称点附近，通常采用如图 2-1 中左图所示的 8 能带（考虑进自旋）Kane 模型 [255] 来描述。在 Kane 模型中，价带电子来自价电子的  $p$  成键轨道

(轨道角动量  $l = 1$ )，用  $X$ 、 $Y$  和  $Z$  标记。在考虑自旋轨道耦合后，价带电子波函数分别具有  $T_d$  双群的  $\Gamma_7$  (总角动量  $j = \frac{1}{2}$ ，两重简并) 和  $\Gamma_8$  (总角动量  $j = \frac{3}{2}$ ，四重简并) 不可约表示的变换性质。最低导带电子来自价电子的  $s$  反成键轨道 (轨道角动量  $l = 0$ )，用  $S$  标记。考虑自旋轨道耦合后导带电子波函数具有  $\Gamma_6$  (总角动量  $j = \frac{1}{2}$ ，两重简并) 不可约表示的变换性质。除了 8 带的 Kane 模型，包含了更高导带的 14 带的扩展 Kane 模型 [333] (图 2-1 中的右图) 有时也被采用。在这个模型中，来自价电子的能量更高的  $p$  反成键轨道也被包含进来，用  $X'$ 、 $Y'$  和  $Z'$  标记，考虑自旋轨道耦合后的电子波函数分别具有  $\Gamma_7$  和  $\Gamma_8$  不可约表示的变换性质。以上描述各带的群表示的基函数在表 2-1 中给出。

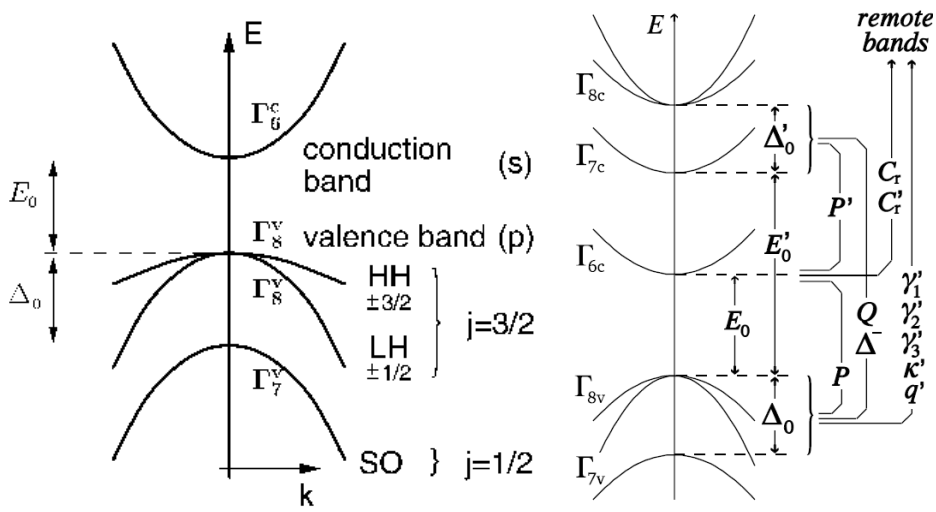


图 2-1: 闪锌矿结构的半导体在  $\Gamma$  点附近的 8 能带 Kane 模型 (左图) 和 14 能带的扩展 Kane 模型 (右图) 示意图。摘自文献 [333]。

$\Gamma_8^c$	$ \frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle_c = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} X'+iY' \\ 0 \end{pmatrix}$	$ \frac{3}{2} - \frac{1}{2}\rangle_c = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} X'-iY' \\ 2Z' \end{pmatrix}$
	$ \frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle_c = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2Z' \\ -X'-iY' \end{pmatrix}$	$ \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\rangle_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ X'-iY' \end{pmatrix}$
$\Gamma_7^c$	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle_c = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} Z' \\ X'+iY' \end{pmatrix}$	$ \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle_c = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} X'-iY' \\ -Z' \end{pmatrix}$
$\Gamma_6^c$	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle_c = \begin{pmatrix} S \\ 0 \end{pmatrix}$	$ \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle_c = \begin{pmatrix} 0 \\ S \end{pmatrix}$
$\Gamma_8^v$	$ \frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle_v = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} X+iY \\ 0 \end{pmatrix}$	$ \frac{3}{2} - \frac{1}{2}\rangle_v = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} X-iY \\ 2Z \end{pmatrix}$
	$ \frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle_v = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2Z \\ -X-iY \end{pmatrix}$	$ \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\rangle_v = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ X-iY \end{pmatrix}$
$\Gamma_7^v$	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle_v = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} Z \\ X+iY \end{pmatrix}$	$ \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle_v = -\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} X-iY \\ -Z \end{pmatrix}$

表 2-1: 扩展 Kane 模型的基函数用自旋轨道耦合表象  $\{|jm\rangle\}$  的表示: 根据时间反演对称性可以选择  $|S\rangle$ ,  $|X'\rangle$ ,  $|Y'\rangle$  和  $|Z'\rangle$  是纯虚的,  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$  和  $|Z\rangle$  是实的 [333]。



取  $x$ 、 $y$  和  $z$  轴分别沿着 [100]、[010] 和 [001] 晶向，在表 2-1 所给出的基下，8 带的 Kane 模型哈密顿量的矩阵形式为 [255]

$$H_{8 \times 8}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{6c6c} & H_{6c8v} & H_{6c7v} \\ H_{8v6c} & H_{8v8v} & H_{8v7v} \\ H_{7v6c} & H_{7v8v} & H_{7v7v} \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

其中  $\Gamma_6$  导带与  $\Gamma_7$  自旋劈裂价带都是对角的，可以分别写为  $H_{6c6c} = (E_v + E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e'})I_{2 \times 2}$  以及  $H_{7v7v} = (E_v - \Delta_0 - \frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_1 k^2)I_{2 \times 2}$ 。这里  $I_{2 \times 2}$  表示  $2 \times 2$  的单位阵， $E_0$  是  $\Gamma$  处导带价带间的能隙， $E_v$  是价带顶的位置， $\Delta_0$  为方程 (2.6) 第二项导致的自旋劈裂能， $m_e'$  是考虑了更高导带的微扰贡献后导带电子的有效质量。 $H_{8v8v}$  对应  $\Gamma_8^v$  价带的  $4 \times 4$  表示矩阵，可以写为

$$H_{8v8v} = \begin{pmatrix} F' & H' & I' & 0 \\ H'^* & G' & 0 & I' \\ I'^* & 0 & G' & -H' \\ 0 & I'^* & -H'^* & F' \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

耦合自旋劈裂带与轻、重空穴带的非对角部分为

$$H_{7v8v} = H_{8v7v}^\dagger = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{2}}H'^* & -\sqrt{\frac{1}{2}}(G'^* - F'^*) & \sqrt{\frac{3}{2}}H' & \sqrt{2}I' \\ -\sqrt{2}I'^* & \sqrt{\frac{3}{2}}H'^* & \sqrt{\frac{1}{2}}(G'^* - F'^*) & -\sqrt{\frac{1}{2}}H' \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

耦合导带与价带的非对角部分为

$$H_{6c8v} = H_{8v6c}^\dagger = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}K_+^{8v} & \sqrt{\frac{2}{3}}K_z^{8v} + \frac{1}{\sqrt{6}}K_{\parallel}^{8v} & \sqrt{\frac{1}{6}}K_-^{8v} & \frac{1}{3\sqrt{2}}K_M^{8v} \\ -\frac{1}{3\sqrt{2}}K_M^{8v} & -\sqrt{\frac{1}{6}}K_+^{8v} & \sqrt{\frac{2}{3}}K_z^{8v} - \frac{1}{\sqrt{6}}K_{\parallel}^{8v} & \frac{1}{\sqrt{2}}K_-^{8v} \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

$$H_{6c7v} = H_{7v6c}^\dagger = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}}K_z^{7v} & -\frac{1}{\sqrt{3}}K_-^{7v} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}K_+^{7v} & \frac{1}{\sqrt{3}}K_z^{7v} \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

以上矩阵中的矩阵元分别为  $F' = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0}[\gamma'_1 k^2 + \gamma'_2(k^2 - 3k_z^2)]$ ， $G' = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0}[\gamma'_1 k^2 - \gamma'_2(k^2 - 3k_z^2)]$ ， $H' = 2\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_z(k_x - ik_y)$ ， $I' = \sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}[\gamma'_2(k_x^2 - k_y^2) - i2\gamma'_3 k_x k_y]$ ， $K_{\pm}^{8v(7v)} = Pk_{\pm} \mp B_{8v(7v)}^+ k_{\mp} k_z$ ， $K_z^{8v(7v)} = Pk_z + iB_{8v(7v)}^+ k_x k_y$ ， $K_{\parallel}^{8v} = B_{8v}^-(k_x^2 - k_y^2)$ ， $K_M^{8v} = B_{8v}^-(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2)$ 。这里  $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ ， $P = \frac{\hbar}{m_0}\langle S|p_z|Z\rangle$ ， $B_{8v(7v)}^{\pm}$  的表达式可以参考文献 [333]。

需要指出的是，如果将  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量 (2.5) 直接写在表 2-1 中所给出的 Kane 模型的 8 个基或者扩展 Kane 模型的 14 个基下，也即只考虑这 8 个带或者 14 个带的子空间内的  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  耦合， $H_{8 \times 8}(\mathbf{k})$  的 Kane 哈密顿量或者  $H_{14 \times 14}(\mathbf{k})$  的扩展 Kane 哈密顿量的非对角部分只会有动量  $\mathbf{k}$  的线性项，而不会有二次项。对于  $H_{8 \times 8}(\mathbf{k})$  的 Kane 哈密

顿量，这意味着系数  $\gamma'_{2,3}$  和  $B_{8v(\gamma v)}^\pm$  都为零 [333]。这时候的（扩展）Kane 模型叫一阶（扩展）Kane 模型。上面给出的 Kane 模型中的非对角部分的二次项来自于更高导带的二阶微扰贡献，它们可以从  $14 \times 14$  的一阶扩展 Kane 哈密顿量通过 Löwdin 块对角化方法 [333, 334] 得到。因此这里所给出的实际上是二阶 Kane 模型。而如果要写出二阶扩展 Kane 哈密顿量，基于同样的道理，更远的能带需要通过二阶微扰考虑进来。另外，有些关注空穴的研究采用  $6 \times 6$ （包括  $\Gamma_{7,8}^v$  价带）或者  $4 \times 4$ （只包括  $\Gamma_8^v$  价带）的 Luttinger 模型来描述价带 [335–337]。Luttinger 哈密顿量的矩阵表示和（扩展）Kane 哈密顿量中所含的对应部分在形式上一样，只不过其它的带（特别是导带）没有显式的包含进来，而是以二阶微扰的形式加以考虑。因此，系数  $\gamma'_{1,2,3}$  和  $B_{8v(\gamma v)}^\pm$  会有所修正 [333]。从 Kane 模型到 Luttinger 模型， $\gamma'_{1,2,3}$  相应地变为  $\gamma_{1,2,3}$ ，后者称为 Luttinger 参数。 $\gamma'_{1,2,3}$  和  $\gamma_{1,2,3}$  的关系为 [333]

$$\gamma_1 = \gamma'_1 + 2m_0P^2/(3\hbar^2E_0), \quad (2.12)$$

$$\gamma_{2,3} = \gamma'_{2,3} + m_0P^2/(3\hbar^2E_0). \quad (2.13)$$

最后，当系统存在应力等作用时，Kane 哈密顿量需要引入额外的修正，这些修正在文献 [1, 333, 337] 中给出。

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  方法给出描述多能带的哈密顿量形式，其具体参数还有赖于和针对能带结构的第一性原理计算以及实验测量的比较而得到。不同材料的  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量中的一些参量，比如动量矩阵元、带隙和电子有效质量等，可以在文献如 [333] 中查到。对于 GaAs，带隙为  $E_0 = 1.519$  eV，自旋劈裂能  $\Delta_0 = 0.341$  eV，导带电子有效质量  $m'_e = 0.067m_0$ ，动量矩阵元  $P = 10.493$  eV·Å，Luttinger 参数分别为  $\gamma_1 = 6.85$ ， $\gamma_2 = 2.10$  以及  $\gamma_3 = 2.9$ 。

### 2.1.3 体结构中的自旋轨道耦合

在章节 1.4.2 中，我们已经指出，在空间反演对称破缺的情况下，即使没有外加磁场，自旋的简并也会去除。这种自旋劈裂可以用自旋轨道耦合导致的有效磁场来描述。在体的空间反演对称破缺的情况下，这种自旋轨道耦合是 Dresselhaus 自旋轨道耦合 [258]；在结构的空反演对称破缺的情况下，这种自旋轨道耦合是 Rashba 自旋轨道耦合 [66]。如果以上两种形式的空间反演对称破缺都存在，则系统同时具有 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合。Dresselhaus 自旋轨道耦合只与微观的自旋轨道耦合 (2.2) 的强度有关，而 Rashba 自旋轨道耦合不仅与它有关，还与造成结构反演对称破缺的外势有关。这些自旋轨道耦合可以从描述多带的  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量（加上可能存在的外势）出发块对角化到需要考虑的子空间（如低的导带）得到。注意在块对角化的过程中，除了可以得到 Dresselhaus 和/或 Rashba 自旋轨道耦合，电子的有效质量也会得到修正。下面我们以闪锌矿半导体的最低导带为例，给出电子的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合。具体的块对角化过程参考文献 [333]。

从一阶扩展 Kane 模型做三阶块对角化，或者从二阶 Kane 模型做二阶块对角化，

可以得到包括自旋轨道耦合的最低导带的有效哈密顿量,

$$\tilde{\mathcal{H}}_{6c} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Omega}_{6c}^D(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.14)$$

其中 Dresselhaus 自旋轨道耦合有效磁场具有形式

$$\boldsymbol{\Omega}_{6c}^D(\mathbf{k}) = 2\gamma_{6c}^D [k_x(k_y^2 - k_z^2), k_y(k_z^2 - k_x^2), k_z(k_x^2 - k_y^2)]. \quad (2.15)$$

在一阶扩展 Kane 模型的三阶块对角化下, 自旋轨道耦合系数为

$$\gamma_{6c}^D = -\frac{8i}{3} PP'Q \left[ \frac{1}{(E_0 + \Delta_0)(E_0 - E'_0 - \Delta'_0)} - \frac{1}{E_0(E_0 - E'_0)} \right]. \quad (2.16)$$

这里  $E'_0$  代表  $\Gamma_{8v}$  价带顶到  $\Gamma_{7c}$  导带底的能量差, 而  $\Delta'_0$  是  $\Gamma_{7c}$  与  $\Gamma_{8c}$  导带的自旋轨道劈裂 (见图 2-1 的右图)。动量矩阵元  $P' = \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_x | X' \rangle$ ,  $Q = \frac{\hbar}{m_0} \langle X | p_y | Z' \rangle$ 。若从二阶 Kane 模型做二阶块对角化, 则自旋轨道耦合系数不显含参量  $P'$  和  $Q$ , 它们都被吸收到参量  $B_{7v,8v}^\pm$  中。在  $B^+ \equiv 1/m_{cv}$  以及  $B^- = 0$  的近似下, Dresselhaus 自旋轨道耦合系数可以表示成 [1]

$$\gamma_{6c}^D = 2\eta / [3m_{cv} \sqrt{2m_e E_0 (1 - \eta/3)}], \quad (2.17)$$

其中  $\eta = \Delta_0 / (E_0 + \Delta_0)$ 。对于 Si、Ge 等具有空间反演对称性的 IV 族半导体, 反成键的  $S$  和  $X'$  轨道具有奇的宇称, 因而动量矩阵元  $P' = 0$ , 这时不存在 Dresselhaus 自旋轨道耦合 [333]。而对于没有反演对称中心的 III-V 族半导体,  $S$  和  $X'$  没有特定的宇称, 动量矩阵元  $P' \neq 0$ , 因而 Dresselhaus 自旋轨道耦合是存在的。

当存在外电场或者由于结构上的原因使系统存在内建电场的时候, Rashba 自旋轨道耦合会出现。在一阶扩展 Kane 哈密顿量的导带与价带对角项上分别加入位置依赖的标势  $V_c(\mathbf{r})$  与  $V_v(\mathbf{r})$  [由于导带和价带带边能量对实空间位置的依赖不一样 (通常由界面引起), 导带和价带感受到的势可以不同 [333]], 然后从这个“准”体的哈密顿量出发进行三阶 Löwdin 块对角化得到最低导带的 Rashba 自旋轨道耦合 [333]

$$\mathcal{H}_{6c}^R = \alpha_{6c}^R \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \times \boldsymbol{\mathcal{E}}, \quad (2.18)$$

其中  $\boldsymbol{\mathcal{E}} = \frac{1}{e} \nabla V_v(\mathbf{r})$ , 是价带电子感受到的电场。Rashba 系数 [333]

$$\alpha_{6c}^R = \frac{eP^2}{3} \left[ \frac{1}{E_0^2} - \frac{1}{(E_0 + \Delta_0)^2} \right] + \frac{eP'^2}{3} \left[ \frac{1}{(E_0 - E'_0)^2} - \frac{1}{(E_0 - E'_0 - \Delta'_0)^2} \right]. \quad (2.19)$$

从上面的过程中可以看出, 从  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量出发利用块对角化手段得到的自旋轨道耦合的系数的大小依赖于  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  参数。对于最低导带的 Dresselhaus 自旋轨道耦合, 在 GaAs 中, 式 (2.16) 给出的自旋轨道耦合系数在  $21 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^3$  左右 [338–340]。

如果取  $m_{cv} = m_0$ ，则式 (2.17) 给出的数值为  $5.7 \text{ eV}\cdot\text{\AA}^3$  [277]。除了直接的  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  计算，还可以用有效自旋轨道耦合给出的自旋劈裂与其它的能带计算得到的自旋劈裂做比较来确定 Dresselhaus 自旋轨道耦合系数。式 (2.15) 给出的自旋劈裂的理论值为  $\Delta E = 2\gamma_{6c}^D[k^2(k_x^2k_y^2 + k_x^2k_z^2 + k_y^2k_z^2) - 9k_x^2k_y^2k_z^2]^{1/2}$ 。在 GaAs 中， $sp^3s^*$  模型与  $sp^3d^5s^*$  模型紧束缚计算分别给出  $\gamma_{6c}^D = 17$  和  $23.9 \text{ eV}\cdot\text{\AA}^3$  [340–342]。赝势法与第一性原理计算分别给出  $\gamma_{6c}^D = 5.7\text{--}8.3 \text{ eV}\cdot\text{\AA}^3$  与  $6.4\text{--}8.5 \text{ eV}\cdot\text{\AA}^3$  [343, 344]。可见不同理论计算得到的结果相差很大。实验上，拉曼散射等测量给出的 GaAs 导带 Dresselhaus 自旋轨道耦合系数也有很大的差别，从 9 到  $35 \text{ eV}\cdot\text{\AA}^3$  不等 [345–352]。通过拟合 Kikkawa 和 Awschalom 测得的 GaAs 体材料中电子自旋弛豫时间 [74]，Jiang 和 Wu 得到  $\gamma_{6c}^D \approx 8.2 \text{ eV}\cdot\text{\AA}^3$  [300]。此外，在不同材料中，Dresselhaus 系数的差别更大，比如 GaSb 中达到  $68.8\text{--}186 \text{ eV}\cdot\text{\AA}^3$ ，远大于 GaAs 中的值 [343, 344]。而对于宽带隙的 GaN 材料， $sp^3s^*$  模型与  $sp^3d^5s^*$  模型分别给出  $\gamma_{6c}^D = 0.508$  和  $0.235 \text{ eV}\cdot\text{\AA}^3$ ，比 GaAs 要小一到两个量级 [353]。对于最低导带的 Rashba 自旋轨道耦合，在 GaAs 中， $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  方法与  $sp^3s^*$  紧束缚计算给出的系数都在  $5 \text{ e}\text{\AA}^2$  左右 [350, 351]。Jusserand 等人从拉曼散射的实验结果出发，分析了 GaAs 异质结结构中 Rashba 自旋轨道耦合的强度，得到  $\alpha_{6c}^R = 4.1 \pm 0.25 \text{ e}\text{\AA}^2$  [349]。Knap 等人从磁阻测量的实验得到的结果为  $\alpha_{6c}^R = 7.2 \text{ e}\text{\AA}^2$  [350]。相比之下，在 InAs 中的 Rashba 自旋轨道耦合相互作用要强得多，其耦合系数在  $100 \text{ e}\text{\AA}^2$  量级 [350]。

### 2.1.4 二维体系的自旋轨道耦合：子带 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 方法

对于准二维的半导体材料比如量子阱或者异质结，电子能量在约束方向会量子化。这时可以先严格（或近似）解出约束方向的能级和包络波函数，然后以微扰的形式将哈密顿量的其它部分考虑进来，从而得到二维电子系统的有效哈密顿量。

在约束特别强的时候，一阶微扰适用而且操作起来很简单。比如，对于 (001) 方向生长的 III-V 族对称量子阱，为了得到最低导带子带电子的 Dresselhaus 自旋轨道耦合，可以先从有效质量下的动能项外加量子阱约束势解出约束方向的最低子带波函数，然后利用一阶微扰得到该准二维系统的电子的 Dresselhaus 自旋轨道耦合 [333]

$$\Omega_{6c}^D(\mathbf{k}) = 2\gamma_{6c}^D[k_x(k_y^2 - \langle k_z^2 \rangle), k_y(\langle k_z^2 \rangle - k_x^2), 0], \quad (2.20)$$

其中  $\langle k_z^2 \rangle$  为算符  $(-i\partial_z)^2$  在量子阱最低子带包络函数上的平均值。 $\langle k_z \rangle = 0$ ，所以沿着  $z$  方向没有有效磁场。如果要考虑进多个子带，则会涉及到算符  $(-i\partial_z)^2$  以及  $-i\partial_z$  在同一子带内的平均和不同子带间的内积。

获得二维体系的有效哈密顿量的比较严格的方法是子带的  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  方法，它在约束强和弱的情况下都适用。我们以  $z$  方向加约束的情形对该方法简要说明如下。首先取高对称点（比如  $\Gamma$  点）处的多带  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  哈密顿量（比如  $8 \times 8$  的 Kane 哈密顿量）加上外势记为  $H_0$ ，即  $H_0 = H_{8 \times 8}(\mathbf{k} = (0, 0, -i\partial_z)) + V(z)$ （或者只取该哈密顿量的对角部分 [333]），解出  $H_0$  的本征态，记为  $|n\alpha\rangle$ ，其中  $n$  为体的能带指标，而  $\alpha$  为子带指标。

然后在  $\{|n\alpha\rangle\}$  构成的基下写出完整的哈密顿量  $H = H_{8\times 8}(\mathbf{k} = (k_x, k_y, -i\partial_z)) + V(z)$  的矩阵表示。最后从这个子带的  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  哈密顿量出发 Löwdin 块对角化到需要考察的子带空间得到其有效的哈密顿量。在实际的操作中，所考虑的子带的数目有限，但是需要保证计算的收敛（具体的数目与约束的强弱有关系）。

在这里，我们以沿着  $[001]||z$  方向生长且施加了应力的非对称  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$  和  $\text{SiO}_2/\text{Ge}/\text{Si}_{0.3}\text{Ge}_{0.7}$  量子阱为例，从  $6\times 6$  的 Luttinger 哈密顿量出发<sup>①</sup>，应用子带  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  方法研究最低空穴带的 Rashba 自旋轨道耦合 [301]。  $\text{SiO}_2$  层被视为无穷高势垒。由于大的门电压（导致  $\geq 50$  kV/cm 的电场），价带的带边在  $\text{Si}/\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$  ( $\text{Ge}/\text{Si}_{0.3}\text{Ge}_{0.7}$ ) 界面处的非连续  $[\approx 55$  meV ( $\approx 200$  meV) [355]] 可以忽略。此外，在三角势近似下 [329, 354, 356]，中间的 Si (Ge) 层的厚度变得无关紧要。

基于 Luttinger 模型 [335, 336]，施加了应力的量子阱里的价带可以用  $6\times 6$  的有效哈密顿量描述 [329]，

$$H = H_L^{(0)} + H_L^{(||)} + H_\epsilon + V(z)I_6. \quad (2.21)$$

这里  $H_L \equiv H_L^{(0)} + H_L^{(||)}$  是 Luttinger 哈密顿量 [335–337]， $H_L^{(0)}$  是其中  $k_{x,y} = 0$  的部分。 $H_\epsilon$  是双轴应力的贡献 [335–337, 357]。 $V(z)$  是  $z$  方向的约束势， $I_6$  是  $6\times 6$  的单位阵。子带包络函数可以通过求解  $H_0 = H_L^{(0)} + H_\epsilon + V(z)I_6$  的本征方程得到，

$$\begin{aligned} \Psi_{1ln}(z) &= \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_n^{(l1)}(z) \\ 0 \\ 0 \\ i\chi_n^{(l2)}(z) \\ 0 \end{pmatrix}, \Psi_{2ln}(z) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \chi_n^{(l1)}(z) \\ 0 \\ 0 \\ i\chi_n^{(l2)}(z) \end{pmatrix}, \Psi_{1hn}(z) = \begin{pmatrix} \chi_n^{(h)}(z) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \Psi_{2hn}(z) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \chi_n^{(h)}(z) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \Psi_{1sn}(z) = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_n^{(s1)}(z) \\ 0 \\ 0 \\ i\chi_n^{(s2)}(z) \\ 0 \end{pmatrix}, \Psi_{2sn}(z) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \chi_n^{(s1)}(z) \\ 0 \\ 0 \\ i\chi_n^{(s2)}(z) \end{pmatrix}. \quad (2.22) \end{aligned}$$

这里  $l$ ,  $h$  和  $s$  分别代表轻空穴 (LH)，重空穴 (HH) 和自旋劈裂 (SO) 带，指标 1 和 2 对应两种自旋态，而  $n$  是子带指标。下面我们具体求解这些包络函数。

<sup>①</sup>在 Si 中， $\Gamma$  点处的直接带隙  $E_g$  远远大于自旋劈裂能  $\Delta_0$  ( $E_g = 3.4$  eV 以及  $\Delta = 0.044$  eV) [354]，因而导带对最低轻空穴带的自旋劈裂的贡献可以忽略。Ge 的带隙  $E_g$  相对来说要小很多 ( $E_g = 0.9$  eV 以及  $\Delta_0 = 0.3$  eV) [354]，但是  $\Gamma_{6c}$  导带被发现对最低重空穴带的自旋劈裂没贡献。因而，在我们的研究中， $6\times 6$  的 Luttinger 模型，而非更大的 (扩展) Kane 模型 [333]，已经足够。

包络函数  $\Psi_{\lambda\alpha n}(z)$  ( $\lambda=1, 2; \alpha=h, l, s$ ) 满足本征方程

$$H_0\Psi_{\lambda\alpha n}(z) = E_n^{(\alpha)}\Psi_{\lambda\alpha n}(z) \quad (2.23)$$

其中  $H_0 = H_L^{(0)} + H_\epsilon + V(z)I_6$ 。  $\Psi_{\lambda hn}(z)$  只有一个分量  $\chi_n^{(h)}$ ，满足  $[\frac{\hbar^2}{2m_z^{(h)}}\frac{d^2}{dz^2} + V(z)]\chi_n^{(h)}(z) = E_n^{(h)}\chi_n^{(h)}(z)$ ，其中  $m_z^{(h)} = m_0/(A-B)$ 。这个方程可以直接求解。包络函数  $\Psi_{\lambda\beta n}(z)$  ( $\beta=l, s$ ) 有两个分量， $\chi_n^{(\beta 1)}$  和  $\chi_n^{(\beta 2)}$  满足

$$H_0^{(ls)} \begin{pmatrix} \chi_n^{(\beta 1)}(z) \\ \chi_n^{(\beta 2)}(z) \end{pmatrix} = E_n^{(\beta)} \begin{pmatrix} \chi_n^{(\beta 1)}(z) \\ \chi_n^{(\beta 2)}(z) \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

这里

$$H_0^{(ls)} = \begin{pmatrix} (A+B)\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dz^2} & -\sqrt{2}B\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dz^2} \\ -\sqrt{2}B\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dz^2} & A\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dz^2} - \Delta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E_\epsilon & -\frac{E_\epsilon}{\sqrt{2}} \\ -\frac{E_\epsilon}{\sqrt{2}} & \frac{E_\epsilon}{2} \end{pmatrix} + V(z)I_2, \quad (2.25)$$

其中等号右边第二项来自双轴应力的贡献 [335–337, 357]。  $E_\epsilon = -2b(2c_{12}/c_{11}+1)\delta$ ， $c_{11}$  和  $c_{12}$  是弹性系数， $b$  是形变势常数， $\delta$  是界面处的晶格不匹配度 [355, 357]。对于 Si/Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> (Ge/Si<sub>0.3</sub>Ge<sub>0.7</sub>) 量子阱， $E_\epsilon$  是 95.8 meV (–115.7 meV)。  $\Delta$  是自旋轨道劈裂。满足  $\langle \chi_n^{(\beta 1)}(z) | \chi_n^{(\beta 1)}(z) \rangle > \langle \chi_n^{(\beta 2)}(z) | \chi_n^{(\beta 2)}(z) \rangle$  的解对应类轻空穴型的 LH 态，因而  $\beta$  标记为  $l$ 。否则视为类自旋劈裂型的态， $\beta = s$ 。

用使方程 (A.3) 中的应力项对角化的么正变换作用到方程 (A.2) 上，我们得到

$$\tilde{H}_0^{(ls)} = U^{-1}H_0^{ls}U = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2}{dz^2} + E_1 & -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} & \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{d^2}{dz^2} + E_2 \end{pmatrix} + V(z)I_2. \quad (2.26)$$

这里

$$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{N_1}} & \frac{1}{\sqrt{N_2}} \\ \sqrt{\frac{2}{N_1}}(1 - \frac{E_1}{E_\epsilon}) & \sqrt{\frac{2}{N_2}}(1 - \frac{E_2}{E_\epsilon}) \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

是么正矩阵，其中  $E_1 = \frac{1}{2}(\frac{3}{2}E_\epsilon - \Delta + \sqrt{9E_\epsilon^2/4 + \Delta E_\epsilon + \Delta^2})$ ， $E_2 = \frac{1}{2}(\frac{3}{2}E_\epsilon - \Delta - \sqrt{9E_\epsilon^2/4 + \Delta E_\epsilon + \Delta^2})$  以及  $N_{1,2} = 1 + 2(1 - E_{1,2}/E_\epsilon)^2$ 。方程 (A.4) 中的  $m_1$ ， $m_2$  和  $m^*$  满足

$$m_1 = m_0 \left[ A + B \left( \frac{1}{2} + \frac{9E_\epsilon/4 + \Delta/2}{\sqrt{9E_\epsilon^2/4 + \Delta E_\epsilon + \Delta^2}} \right) \right]^{-1}, \quad (2.28)$$

$$m_2 = m_0 \left[ A + B \left( \frac{1}{2} - \frac{9E_\epsilon/4 + \Delta/2}{\sqrt{9E_\epsilon^2/4 + \Delta E_\epsilon + \Delta^2}} \right) \right]^{-1}, \quad (2.29)$$

$$m^* = m_0 \frac{E_\epsilon \sqrt{9/4 + \Delta/E_\epsilon + (\Delta/E_\epsilon)^2}}{\sqrt{2}\Delta B}. \quad (2.30)$$

注意到关于有效质量的方程 (A.6)-(A.8) 对于 Si/SiGe 量子阱 ( $E_\epsilon > 0$ ) 和 Ge/SiGe 量子阱 ( $E_\epsilon < 0$ ) 都成立。而文献 [329] 中的方程 (5)-(6) 只有在  $E_\epsilon > 0$  时与方程 (A.6)-(A.8) 等价，因而前者只对 Si/SiGe 量子阱成立。

$\tilde{H}_0^{(ls)}$  可以被拆为对角部分  $\tilde{H}_{0D}^{(ls)}$  和非对角部分  $\tilde{H}_{0O}^{(ls)}$ 。在非简并微扰方法中， $\tilde{H}_{0O}^{(ls)}$  被处理成微扰项。 $\tilde{H}_{0D}^{(ls)}$  的本征方程可以直接求解，其本征值  $E_{n1}$  和  $E_{n2}$  以及相对应的本征函数

$$\begin{pmatrix} \chi_{n1}(z) \\ 0 \end{pmatrix} \text{ 和 } \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_{n2}(z) \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

由薛定谔方程  $[\frac{\hbar^2}{2m_\xi} \frac{d^2}{dz^2} + E_\xi + V(z)]\chi_{n\xi}(z) = E_{n\xi}\chi_{n\xi}(z)$  ( $\xi = 1, 2$ ) 决定。这里，我们称  $\tilde{H}_{0D}^{(ls)}$  的本征态为“未微扰的子带”。

在关于  $\tilde{H}_{0O}^{(ls)}$  的一阶微扰下，微扰的本征值为  $E_n^{(1)} = E_{n1}$  及  $E_n^{(2)} = E_{n2}$ ，相应的微扰的本征态分别为

$$\begin{pmatrix} \chi_{n1}(z) \\ \sum_{n'} \frac{w_{n'2n1}}{E_{n1} - E_{n'2}} \chi_{n'2}(z) \end{pmatrix} \text{ 和 } \begin{pmatrix} \sum_{n'} \frac{w_{n'1n2}}{E_{n2} - E_{n'1}} \chi_{n'1}(z) \\ \chi_{n2}(z) \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

这里  $w_{n\xi n'\xi'} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \chi_{n\xi} \frac{d^2 \chi_{n'\xi'}}{dz^2}$  ( $\xi, \xi' = 1, 2$ )。最终， $H_0^{(ls)}$  的本征值  $E_n^{(\beta)}$  为  $E_n^{(1)}$  和  $E_n^{(2)}$ ，而对应的本征函数  $(\chi_n^{(\beta 1)}(z), \chi_n^{(\beta 2)}(z))^T$  为

$$U \begin{pmatrix} \chi_{n1}(z) \\ \sum_{n'} \frac{w_{n'2n1}}{E_{n1} - E_{n'2}} \chi_{n'2}(z) \end{pmatrix} \text{ 和 } U \begin{pmatrix} \sum_{n'} \frac{w_{n'1n2}}{E_{n2} - E_{n'1}} \chi_{n'1}(z) \\ \chi_{n2}(z) \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

注意到非简并微扰方法在仅考虑能量为  $E_{01}$  和  $E_{02}$  的两个子带（即，能量最低的未微扰的对应于类 LH 型和类 SO 型的空穴态）时才成立。否则，当更多的子带被考虑时，如果某两个能级  $E_{n1}$  和  $E_{n'2}$  非常接近，计算中可能会导致发散，因为在包络函数  $\Psi_{\lambda xn}(z)$  ( $x = l$  和  $s$ ) 中有正比于  $\frac{1}{E_{n1} - E_{n'2}}$  的项 [参考方程 (A.13)]。但是为了保证收敛，考虑足够多的子带是必要的。因此，作为非简并微扰方法的替代，我们在取由方程 (A.9) 组成的足够多数目的基下，应用严格对角化方法来得到  $\tilde{H}_0^{(ls)}$  的本征态。

在  $\Psi_{\lambda \alpha n}$  ( $\lambda=1, 2; \alpha=h, l, s$ ) 构成的基下，写出  $H$  的矩阵表示，做 Löwdin 块对角化到关于  $H_L^{(ll)}$  的二阶，我们可以得到最低空穴子带的有效哈密顿量。由于双轴应力

的影响 [335–337, 357], Si/SiGe 量子阱中最低空穴子带是轻空穴型的 (LH0) (实际上是 LH 和 SO 空穴态的混合, 但是轻空穴成分大), 而 Ge/SiGe 量子阱中最低空穴子带是重空穴型的 (HH0)。对于 Si/SiGe (Ge/SiGe) 量子阱, 描述最低空穴子带的有效哈密顿量可以写为 [329]

$$H_{\text{eff}}^{l(h)} = -\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^{l(h)}} - \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}^{l(h)}(k_x, k_y), \quad (2.34)$$

这里  $\mathbf{k}$  是平面内的动量,  $m^l$  ( $m^h$ ) 是最低轻 (重) 空穴子带的电子的平面内的有效质量。对于 Si/SiGe 的 LH0 子带而言, 有效质量和 Rashba 自旋轨道耦合为

$$m^l = m_0 [A - B(\lambda_{00}^{(l1l1)}/2 - \sqrt{2}\lambda_{00}^{(l1l2)})]^{-1}, \quad (2.35)$$

$$\boldsymbol{\Omega}^l = \boldsymbol{\Omega}_1^l + \boldsymbol{\Omega}_3^l, \quad (2.36)$$

$$\Omega_{1x,y}^l = \Xi k_{x,y}, \quad (2.37)$$

$$\Omega_{3x}^l = \Pi B k_x (k_x^2 + k_y^2) + \Theta [3B k_x (k_x^2 - k_y^2) + 2\sqrt{3(3B^2 + C^2)} k_y^2 k_x], \quad (2.38)$$

$$\Omega_{3y}^l = \Pi B k_y (k_x^2 + k_y^2) + \Theta [3B k_y (k_y^2 - k_x^2) + 2\sqrt{3(3B^2 + C^2)} k_x^2 k_y], \quad (2.39)$$

其中

$$\Xi = \frac{\hbar}{m_0} \sqrt{6(3B^2 + C^2)} \kappa_{00}^{(l1l2)}, \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} \Pi = & -\frac{\hbar^3}{2m_0^2} \sqrt{\frac{3(3B^2 + C^2)}{2}} \sum_{\alpha=l,s} \sum_{n=0}^{\infty} (1 - \delta_{l\alpha} \delta_{0n}) \frac{\kappa_{0n}^{(l1\alpha 2)} - \kappa_{0n}^{(l2\alpha 1)}}{E_0^{(l)} - E_n^{(\alpha)}} \\ & \times [\sqrt{2}(\lambda_{0n}^{(l1\alpha 2)} + \lambda_{0n}^{(l2\alpha 1)}) - \lambda_{0n}^{(l1\alpha 1)}], \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\Theta = -\frac{\hbar^3}{2m_0^2} \sqrt{\frac{3B^2 + C^2}{3}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\kappa_{0n}^{(l1h)} - \frac{1}{\sqrt{2}} \kappa_{0n}^{(l2h)}}{E_0^{(l)} - E_n^{(h)}} (\sqrt{2} \lambda_{0n}^{(l2h)} + \lambda_{0n}^{(l1h)}). \quad (2.42)$$

对于 Ge/SiGe 量子阱的 HH0 子带,

$$m^h = m_0 (A + B/2)^{-1}, \quad (2.43)$$

$$\boldsymbol{\Omega}^h = \boldsymbol{\Omega}_3^h, \quad (2.44)$$

$$\Omega_{3x}^h = \Lambda [3B k_x (k_x^2 - k_y^2) - 2\sqrt{3(3B^2 + C^2)} k_y^2 k_x], \quad (2.45)$$

$$\Omega_{3y}^h = \Lambda [3B k_y (k_x^2 - k_y^2) + 2\sqrt{3(3B^2 + C^2)} k_x^2 k_y], \quad (2.46)$$

其中

$$\Lambda = -\frac{\hbar^3}{2m_0^2} \sqrt{\frac{3B^2 + C^2}{3}} \sum_{\alpha=l,s} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\frac{1}{\sqrt{2}} \kappa_{0n}^{(h\alpha 2)} - \kappa_{0n}^{(h\alpha 1)}}{E_0^{(h)} - E_n^{(\alpha)}} (\sqrt{2} \lambda_{0n}^{(h\alpha 2)} + \lambda_{0n}^{(h\alpha 1)}). \quad (2.47)$$



这里  $A$ ,  $B$  和  $C$  是价带参数, 和 Luttinger 参量的关系为  $A = \gamma_1$ ,  $B = 2\gamma_2$  以及  $\sqrt{3B^2 + C^2} = 2\sqrt{3}\gamma_3$ 。  $E_n^{(\alpha)}$  ( $\alpha=h, l, s$ ) 是子带能级。  $\lambda_{nn'}^{(\alpha\beta)}$  和  $\kappa_{nn'}^{(\alpha\beta)}$  定义为  $\lambda_{nn'}^{(\alpha\beta)} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \chi_n^{(\alpha)}(z) \chi_{n'}^{(\beta)}(z)$  以及  $\kappa_{nn'}^{(\alpha\beta)} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \chi_n^{(\alpha)}(z) \frac{d\chi_{n'}^{(\beta)}(z)}{dz}$ 。

在章节 5.4 中, 我们会数值计算上面各个系数的大小, 然后从这个有效的哈密顿量出发研究最低空穴子带里的自旋弛豫。

## 2.2 石墨烯

石墨烯 (graphene) 是一种由碳原子以  $sp^2$  杂化轨道组成的六角型呈蜂巢晶格的平面薄膜。它是只有一个碳原子厚度的二维材料。石墨烯一直被认为是假设性的结构, 无法单独稳定存在。它在 2004 年被 Geim 和 Novoselov 从石墨中分离得到以后 [138, 358] (Geim 和 Novoselov 也因此获得 2010 年的诺贝尔物理学奖), 引起了人们的广泛关注。它为基于全碳的电子学和自旋电子学器件的发展提供了一种可能 [138–142, 358–369]。石墨烯的二维性质、门电压可调控的载流子类型和密度 [140, 370]、高迁移率 [358, 371–374] 以及弱的自旋轨道耦合和超精细相互作用下可能的长的自旋弛豫时间 [164, 246, 316, 375–378] 等性质使它颇具吸引力。

石墨烯的晶格结构如图 2-2 中的左图所示。它属于六角 (hexagonal) 晶系结构, 每个原胞内有两个碳原子, 分别标记为  $A$  和  $B$ 。其对应的倒格子空间的第一布里渊区如图 2-2 中的右图所示, 边界处六个顶点中次近邻的顶点之间相差最小的倒格矢, 是等价的。因而这六个顶点分为等价的两类, 标记为  $\mathbf{K}$  点和  $\mathbf{K}'$  点。在平整的石墨烯中, 碳原子轨道  $sp^2$  杂化, 在平面内形成  $\sigma$  键。 $\sigma$  键的成键轨道能量很低, 一般都被价电子占据, 而反键态的能量很高, 没有电子占据。剩下的各原子垂直石墨烯平面的  $p_z$  轨道形成  $\pi$  键。通过最近邻紧束缚模型可以解出相应的能带结构,  $\pi$  成键轨道构成的能带 (价带) 与反键轨道构成的能带 (导带) 在布里渊区的六个顶角上相接。在顶点附近, 电子可以用零质量的 Dirac 方程描述, 具有线性的色散关系。正因为此, 这些顶点又叫 Dirac 点, 而石墨烯中的低能电子又被称为无质量的 Dirac 费米子。在图 2-3 中我们给出了石墨烯中电子色散关系的示意图 [140]。

### 2.2.1 有效哈密顿量: 紧束缚近似方法

我们从最近邻近似的紧束缚近似方法出发研究石墨烯中 Dirac 点附近电子的行为。从多带的紧束缚有效哈密顿量出发, 通过块对角化方法, 我们可以得到描述成键  $\pi$  带和反成键  $\pi$  带的电子的有效哈密顿量。在考虑原子的自旋轨道耦合以及垂直于石墨烯平面的电场后, 我们得到石墨烯中的内禀自旋轨道耦合和 Rashba 自旋轨道耦合。

我们考虑碳原子的四个轨道  $\mu$ :  $|s\rangle = |0, 0\rangle$ ,  $|p_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|1, 1\rangle + |1, -1\rangle)$ ,  $|p_y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle + |1, -1\rangle)$  以及  $|p_z\rangle = |1, 0\rangle$ 。由这些原子轨道构造 Bloch 态,  $|A(B), \mu\rangle =$

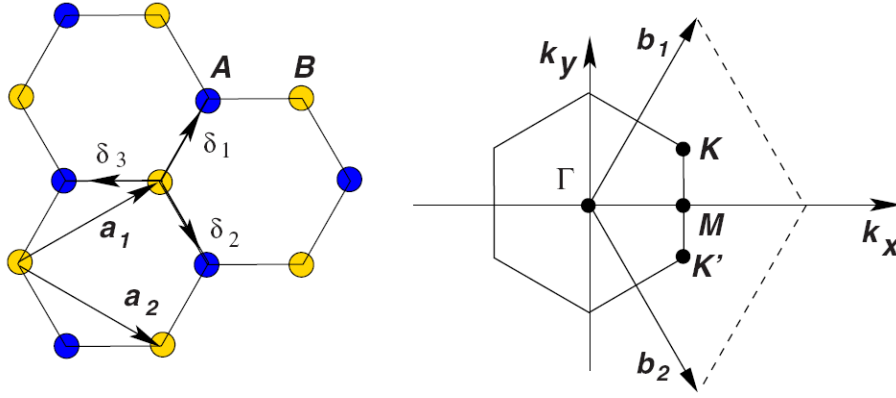


图 2-2: 石墨烯中 A、B 格点构成的复式晶格结构 (左) 与动量空间的第一布里渊区 (右) 的示意图。第一布里渊区的六个顶点为 Dirac 点, 相邻的顶点之间不等价, 次近邻的顶点等价。两类等价的顶点分别标记为  $\mathbf{K}$  与  $\mathbf{K}'$  点。摘自文献 [140]。

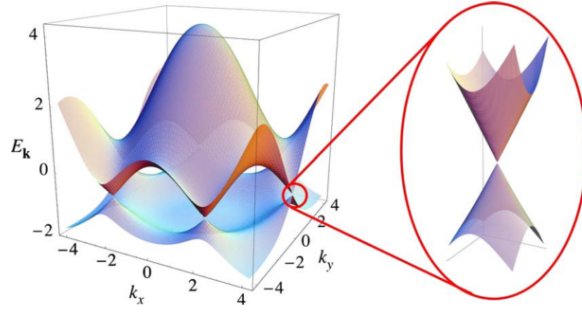


图 2-3: 石墨烯中电子的色散关系的示意图。左图: 二维倒格子空间的能谱, 来自考虑最近邻和次近邻跃迁的紧束缚近似模型。右图: 能谱在一个 Dirac 点附近的放大。摘自文献 [140]。

$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}_{A(B)}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{A(B)}} \mu(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A(B)})$ 。在这些 Bloch 态构成的基下, 紧束缚哈密顿量的矩阵元为 [377]:

$$H_{A,\mu;A,\mu'}(\mathbf{k}) = H_{B,\mu;B,\mu'}(\mathbf{k}) = t_{\mu} \delta_{\mu\mu'}, \quad (2.48)$$

$$H_{A,\mu;B,\mu'}(\mathbf{k}) = H_{B,\mu';A,\mu}^*(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{N}_i} t_{\mu,\mu'}(\mathbf{N}_i). \quad (2.49)$$

这里  $\mathbf{N}_i$  为连接一个碳原子与其最近邻三个碳原子的矢量。如果取  $x$  轴沿着石墨烯中的 zigzag 方向 (图 2-2 左图中垂直于  $AB$  的方向), 则该三个矢量可以写为

$$\left\{ a\left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), a\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}\right), a\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}\right) \right\}, \quad (2.50)$$

这里  $a \approx 0.25$  nm 是晶格常数（次近邻两个碳原子间的距离）。方程 (2.48) 中  $s$  和  $p$  轨道的电子能量  $t_\mu = \varepsilon_s, \varepsilon_p$ 。我们取  $\varepsilon_p = 0$  作为参考。方程 (2.49) 中的最近邻跃迁矩阵元由四个独立的 Slater-Koster [379] 参数  $V_{ss}^\sigma, V_{sp}^\sigma, V_{pp}^\sigma$  和  $V_{pp}^\pi$  来决定。在表 2-2 中，我们给出了在  $s$  和  $p$  轨道间沿着单位矢量  $(n_x, n_y, n_z)$  的跃迁矩阵元 [377]。

$t_s$	$\varepsilon_s$	$t_{p_x, p_x}$	$n_x^2 V_{pp}^\sigma + (1 - n_x^2) V_{pp}^\pi$
$t_p$	$\varepsilon_p$	$t_{p_y, p_y}$	$n_y^2 V_{pp}^\sigma + (1 - n_y^2) V_{pp}^\pi$
$t_{s, s}$	$V_{ss}^\sigma$	$t_{p_z, p_z}$	$n_z^2 V_{pp}^\sigma + (1 - n_z^2) V_{pp}^\pi$
$t_{s, p_x}$	$n_x V_{sp}^\sigma$	$t_{p_x, p_y}$	$n_x n_y V_{pp}^\sigma - n_x n_y V_{pp}^\pi$
$t_{s, p_y}$	$n_y V_{sp}^\sigma$	$t_{p_x, p_z}$	$n_x n_z V_{pp}^\sigma - n_x n_z V_{pp}^\pi$
$t_{s, p_z}$	$n_z V_{sp}^\sigma$	$t_{p_y, p_z}$	$n_y n_z V_{pp}^\sigma - n_y n_z V_{pp}^\pi$

表 2-2: 相邻原子的  $s$  和  $p$  轨道间沿着单位矢量  $(n_x, n_y, n_z)$  的两中心跃迁矩阵元 [377]。

### 2.2.1.1 Dirac 点附近的线性色散

我们首先只考虑  $|A(B), p_z\rangle$  轨道构成的子空间，则紧束缚哈密顿量

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |A, p_z\rangle \\ |B, p_z\rangle \end{matrix}, \quad (2.51)$$

其中  $f(\mathbf{k}) = V_{pp}^\pi \sum_i^{i=1,3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{N}_i}$ 。在 Dirac 点  $\mathbf{K}$  处展开，即取  $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$  ( $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{K}|$ )，则  $f(\mathbf{q}) \approx iV_{pp}^\pi \mathbf{q} \cdot \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{N}_i} \mathbf{N}_i$ 。在  $\mathbf{K} = (\frac{4\pi}{3a}, 0)$  处， $H_0(\mathbf{q}) = v_f(\sigma_x q_x + \sigma_y q_y)$ ，其中  $v_f = \frac{-\sqrt{3}aV_{pp}^\pi}{2}$  为费米速度。在另一个不等价的 Dirac 点  $\mathbf{K}' = (-\frac{4\pi}{3a}, 0)$  处， $H_0(\mathbf{q}) = v_f(-\sigma_x q_x + \sigma_y q_y)$ 。统一起来，在 Dirac 点附近的有效哈密顿量为

$$H_0(\mathbf{q}) = v_f(\mu\sigma_x q_x + \sigma_y q_y). \quad (2.52)$$

这个方程是无质量的二维 Dirac 方程。其中  $\sigma_{x,y}$  是由  $A, B$  格点构成的赝自旋空间的 Pauli 算符。 $\mu = \pm 1$  对应  $\mathbf{K}$  和  $\mathbf{K}'$  两个能谷。可以发现，两个能谷的哈密顿量通过时间反演操作联系。对角化这个哈密顿量即可以得到两个谷中的线性色散关系， $\varepsilon_{\nu\mathbf{q}} = \nu v_f |\mathbf{q}|$ ，其中  $\nu = \pm 1$  分别标记导带和价带，对应的本征波函数分别为  $p_z$  原子轨道构成的  $\pi$  反成键和成键轨道。费米速度  $v_f \approx 10^6$  m/s [140, 378, 380]。注意到这里只考虑了最近邻原子间的跃迁，得到的能谱是各向同性的。如果将次近邻原子间的跃迁也考虑进来，得到的能谱将具有三重旋转对称性 [140]。

### 2.2.1.2 内禀自旋轨道耦合和外禀 Rashba 自旋轨道耦合

为了研究自旋轨道耦合，我们需要将其它原子轨道也考虑进来。这里我们包含进所

有的  $s$  和  $p$  轨道。我们的研究集中在  $\mathbf{k} = \mathbf{K}$  的高对称点。

在不考虑自旋的时候，最近邻近似的紧束缚哈密顿量在  $\mathbf{k} = \mathbf{K}$  处为

$$H(\mathbf{K}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \varepsilon_s & 0 & 0 & 0 & i\alpha & \alpha \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\alpha & -\beta & -i\beta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\alpha & -i\beta & \beta \\ 0 & 0 & 0 & i\alpha & -\alpha & \varepsilon_s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\alpha & -\beta & i\beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & i\beta & \beta & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |A, p_z\rangle \\ |B, p_z\rangle \\ |A, s\rangle \\ |A, p_x\rangle \\ |A, p_y\rangle \\ |B, s\rangle \\ |B, p_x\rangle \\ |B, p_y\rangle \end{matrix}, \quad (2.53)$$

其中  $\alpha = \frac{3}{2}V_{sp}^\sigma$ ,  $\beta = \frac{3}{4}(V_{pp}^\sigma - V_{pp}^\pi)$ 。

对角化  $H(\mathbf{K})$  我们可以得到

$$H(\mathbf{K}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -\gamma_- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\gamma_- & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2\beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma_+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma_+ & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\beta \end{pmatrix} \begin{matrix} |\pi_A\rangle \\ |\pi_B\rangle \\ |\sigma_1\rangle \\ |\sigma_2\rangle \\ |\sigma_3\rangle \\ |\sigma_4\rangle \\ |\sigma_5\rangle \\ |\sigma_6\rangle \end{matrix}, \quad (2.54)$$

其中本征基函数

$$\begin{aligned} |\pi_A\rangle &= |A, p_z\rangle, \\ |\pi_B\rangle &= |B, p_z\rangle, \\ |\sigma_1\rangle &= c_1(\gamma_-|A, s\rangle - i\alpha|B, p_x\rangle + \alpha|B, p_y\rangle), \\ |\sigma_2\rangle &= c_1(-\gamma_-|B, s\rangle - i\alpha|A, p_x\rangle - \alpha|A, p_y\rangle), \\ |\sigma_3\rangle &= \frac{1}{2}(i|A, p_x\rangle - |A, p_y\rangle + i|B, p_x\rangle + |B, p_y\rangle), \\ |\sigma_4\rangle &= c_2(\gamma_+|A, s\rangle - i\alpha|B, p_x\rangle + \alpha|B, p_y\rangle), \\ |\sigma_5\rangle &= c_2(\gamma_+|B, s\rangle - i\alpha|A, p_x\rangle - \alpha|A, p_y\rangle), \\ |\sigma_6\rangle &= \frac{1}{2}(-i|A, p_x\rangle + |A, p_y\rangle + i|B, p_x\rangle + |B, p_y\rangle), \end{aligned} \quad (2.55)$$

这里  $\gamma_\pm = \frac{\sqrt{\varepsilon_s^2 + 8\alpha^2} \pm \varepsilon_s}{2}$ ,  $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2\alpha^2 + \gamma_-^2}}$  以及  $c_2 = \frac{1}{\sqrt{2\alpha^2 + \gamma_+^2}}$ 。

现在我们考虑进自旋自由度，并包含进原子内微观的自旋轨道耦合

$$H_{\text{so}}^a = \xi \sum_i \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{s}_i = \frac{\xi}{2} \sum_i (c_{i\downarrow}^z \dagger c_{i\uparrow}^x - c_{i\uparrow}^z \dagger c_{i\downarrow}^x + i c_{i\uparrow}^z \dagger c_{i\downarrow}^y + i c_{i\downarrow}^z \dagger c_{i\uparrow}^y + i c_{i\uparrow}^y \dagger c_{i\uparrow}^x - i c_{i\downarrow}^y \dagger c_{i\downarrow}^x) + \text{H.C.}, \quad (2.56)$$

这里  $i$  代表各原子， $c_{i\uparrow(\downarrow)}^{x(y,z)}$  代表原子  $i$  的  $p_x$  ( $p_y$  或者  $p_z$ ) 轨道上具有自旋上 (下) 电子的湮灭算符。 $H_{\text{so}}^a$  导致  $\pi$  和  $\sigma$  带间的耦合为

$$H_{\text{so}}^{\pi\sigma}(\mathbf{K}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\xi/2 & 0 & 0 & i\xi/2 \\ 0 & -i\alpha c_1 \xi & 0 & 0 & -i\alpha c_2 \xi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i\alpha c_1 \xi & 0 & 0 & i\alpha c_2 \xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\xi/2 & 0 & 0 & i\xi/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.57)$$

这里横向排列的 12 个基为  $\{|\sigma_{1-6} \uparrow\rangle, |\sigma_{1-6} \downarrow\rangle\}$ ，纵向排列的 4 个基为  $\{|\pi_A \uparrow\rangle, |\pi_A \downarrow\rangle, |\pi_B \uparrow\rangle, |\pi_B \downarrow\rangle\}$ 。

沿着垂直于石墨烯平面的  $z$  方向的电场贡献哈密顿量

$$H_E = eE \sum_i z_i = eE z_0 \sum_{\eta=\uparrow, \downarrow} \sum_i c_{i\eta}^z \dagger c_{i\eta}^s + \text{H.C.}, \quad (2.58)$$

这里  $z_0 = \langle p_z | z | s \rangle$  是算符  $z$  在轨道  $p_z$  和  $s$  之间的矩阵元。电场项导致的  $\pi$  和  $\sigma$  带之间的耦合为

$$H_E^{\pi\sigma}(\mathbf{K}) = \begin{pmatrix} -\gamma_- c_1 \mathcal{E} & 0 & 0 & \gamma_+ c_2 \mathcal{E} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\gamma_- c_1 \mathcal{E} & 0 & 0 & \gamma_+ c_2 \mathcal{E} & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma_- c_1 \mathcal{E} & 0 & 0 & \gamma_+ c_2 \mathcal{E} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\gamma_- c_1 \mathcal{E} & 0 & 0 & \gamma_+ c_2 \mathcal{E} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.59)$$

其中  $\mathcal{E} = eE z_0$ 。

自旋轨道耦合和电场导致的  $\pi$  和  $\sigma$  带之间的总的耦合为

$$H^{\pi\sigma}(\mathbf{K}) = \begin{pmatrix} -\gamma_- c_1 \mathcal{E} & 0 & 0 & \gamma_+ c_2 \mathcal{E} & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\frac{\xi}{2} & 0 & 0 & i\frac{\xi}{2} \\ 0 & -i\alpha c_1 \xi & 0 & 0 & -i\alpha c_2 \xi & 0 & -\gamma_- c_1 \mathcal{E} & 0 & 0 & \gamma_+ c_2 \mathcal{E} & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma_- c_1 \mathcal{E} & 0 & 0 & \gamma_+ c_2 \mathcal{E} & 0 & i\alpha c_1 \xi & 0 & 0 & i\alpha c_2 \xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\frac{\xi}{2} & 0 & 0 & i\frac{\xi}{2} & 0 & -\gamma_- c_1 \mathcal{E} & 0 & 0 & \gamma_+ c_2 \mathcal{E} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.60)$$

对包含了自旋轨道耦合和电场贡献的  $16 \times 16$  的紧束缚哈密顿量做二阶 Löwdin 块对角化到  $\pi$  带的子空间 (保留到电场的一阶项)，可以得到  $\mathbf{K}$  点  $\pi$  带电子的有效哈密顿量

为

$$H^\pi(\mathbf{K}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2\lambda_I & 2i\lambda_R & 0 \\ 0 & -2i\lambda_R & -2\lambda_I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |\pi_A \uparrow\rangle \\ |\pi_A \downarrow\rangle \\ |\pi_B \uparrow\rangle \\ |\pi_B \downarrow\rangle \end{matrix}. \quad (2.61)$$

其中  $\lambda_I = \frac{-\varepsilon_s \xi^2}{18V_{sp}^2}$  以及  $\lambda_R = \frac{e\xi z_0}{3V_{sp}} E$ 。用类似的方法我们可以得到在  $\mathbf{K}'$  点处的有效哈密顿量为

$$H^\pi(\mathbf{K}') = \begin{pmatrix} -2\lambda_I & 0 & 0 & 2i\lambda_R \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2i\lambda_R & 0 & 0 & -2\lambda_I \end{pmatrix} \begin{matrix} |\pi_A \uparrow\rangle \\ |\pi_A \downarrow\rangle \\ |\pi_B \uparrow\rangle \\ |\pi_B \downarrow\rangle \end{matrix}. \quad (2.62)$$

上面的有效哈密顿量可以统一写为

$$H^\pi = -\lambda_I + \lambda_I \mu \sigma_z s_z + \lambda_R (\mu \sigma_x s_y - \sigma_y s_x), \quad (2.63)$$

其中  $s_{x,y,z}$  是电子自旋的 Pauli 矩阵。忽略掉常数项，上面的有效哈密顿量包括两部分，一部分是

$$H_I = \lambda_I \mu \sigma_z s_z, \quad (2.64)$$

为内禀的自旋轨道耦合，而另一部分

$$H_R = \lambda_R (\mu \sigma_x s_y - \sigma_y s_x) \quad (2.65)$$

为外禀的 Rashba 自旋轨道耦合。

### 2.2.2 自旋轨道耦合的性质

注意到上一节中所给出的有效自旋轨道耦合其实是在 Dirac 点处得到的。在 Dirac 点附近的自旋轨道耦合也通常用在该点处的形式来近似。因此，石墨烯中 Dirac 点附近的电子总的有效哈密顿量可以写为

$$H(\mathbf{q}) = v_f (\mu \sigma_x q_x + \sigma_y q_y) + \lambda_I \mu \sigma_z s_z + \lambda_R (\mu \sigma_x s_y - \sigma_y s_x). \quad (2.66)$$

从上一小节的推导中可以看出，这里内禀的自旋轨道耦合来自于原子自旋轨道耦合的二阶微扰贡献，不依赖于电场。这也是它被称为内禀的自旋轨道耦合的原

因。在没有结构反演对称破缺的情况下，内禀的自旋轨道耦合本身不会导致自旋的劈裂，但是它会在 Dirac 点打开能隙。这个效应非常弱。Kane 和 Mele 通过粗糙的估计给出  $\lambda_I \approx 100 \mu\text{eV}$  [164]。考虑  $s$  和  $p$  轨道的紧束缚模型给出  $\lambda_I \sim 0.4 - 1 \mu\text{eV}$  [376, 377, 381]。在考虑了  $d$  轨道以及更高的轨道后，紧束缚模型下得到  $\lambda_I \approx 12 \mu\text{eV}$  [316, 378, 382]。

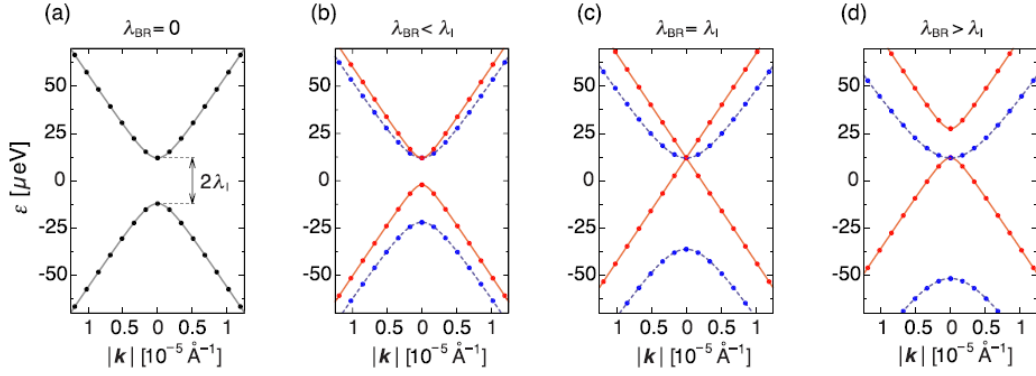
Rashba 自旋轨道耦合来自原子自旋轨道耦合和电场项共同的二阶微扰贡献，与结构上的反演对称破缺密切相关。结构反演对称破缺可以由上面所考虑的外加电场产生，也可以由石墨烯结构上的不平整或者弯曲产生。Rashba 自旋轨道耦合导致自旋的劈裂。垂直电场  $E_z$  贡献的 Rashba 自旋轨道耦合强度记为  $\lambda_R \sim \zeta E_z$ 。粗糙的估计给出  $\zeta \approx 0.258 \mu\text{eV}/(\text{V}/\text{nm})$  [164]，紧束缚近似给出  $\zeta \approx 17.9$  或者  $66.6 \mu\text{eV}/(\text{V}/\text{nm})$  [376, 377]，第一性原理计算得到  $\zeta \approx 5 \mu\text{eV}/(\text{V}/\text{nm})$  [316, 378]。在典型的  $E_z = 300 \text{ kV}/\text{cm}$  的电场下， $\lambda_R$  在  $0.1 \mu\text{eV}$  的量级。具有  $50 \text{ nm}$  曲率半径的结构上的弯曲可以导致  $\lambda_R \sim 8.5 \mu\text{eV}$  [376] 的 Rashba 自旋轨道耦合。但是以上这些数值都非常小，在 DP 机制下会导致长达  $\mu\text{s}$  量级的自旋弛豫时间，远远大于实验上观测到的  $100 \text{ ps}-1 \text{ ns}$  的值。此外，随机的附着原子以及衬底的涨落可以通过在石墨烯中引入  $sp^3$  杂化而增强 Rashba 自旋轨道耦合，最大可使其强度达到  $\text{meV}$  的量级 [315–318, 383]。在这个强的 Rashba 自旋轨道耦合下，DP 机制导致的自旋弛豫时间和实验值可比。因此，附着原子以及衬底的涨落可能是石墨烯中 Rashba 自旋轨道耦合的主要来源。

有效哈密顿量 (2.66) 对角化后在两个能谷给出相同的能谱，

$$\varepsilon_{\eta\nu\mathbf{q}} = \eta\lambda_R + \nu\sqrt{(v_f q)^2 + (\lambda_R - \eta\lambda_I)^2}, \quad (2.67)$$

这里  $\nu = \pm 1$  标记导带和价带， $\eta = \pm 1$  标记两支自旋带。可以发现，在  $\lambda_R < \lambda_I$  时，带隙大小为  $2(\lambda_I - \lambda_R)$ ，而在  $\lambda_R \geq \lambda_I$  时，带隙变为零。此外，该表达式表明，在有 Rashba 自旋轨道耦合的情况下，本征自旋轨道耦合对自旋的劈裂也有贡献。图 2-4 给出了不同的 Rashba 自旋轨道耦合强度下，Dirac 点附近电子的能谱 [378]。

需要指出的是，内禀的自旋轨道耦合满足关于石墨烯平面的镜面反演对称性，这也是理想的没有外加电场的石墨烯所满足的对称性。在施加了垂直于石墨烯平面的电场后，这个对称性消失，描述  $\mathbf{K}$  点的对称性的点群由  $D_{3h}$  降为  $C_{3v}$ 。这种对称性的降低引入了 Rashba 型的自旋轨道耦合。前面我们在提到石墨烯平面的弯曲也会导致 Rashba 型的自旋轨道耦合时，仍假设了  $C_{3v}$  的对称性得以保持 [376]。实际上，在仔细考虑了局部弯曲对电子轨道波函数的杂化的影响后，Jeong 等人发现，结构弯曲除了贡献 Rashba 型的自旋轨道耦合，还有可能贡献额外的自旋轨道耦合。这个额外的自旋轨道耦合在自旋空间是对角的，对每一个能谷相当于提供了符号相反的有效静磁场。在  $x$  轴仍取为图 2-2 左图中垂直于  $AB$  的方向时，结构弯曲导致的局域的自旋轨道耦合



**图 2-4:** 石墨烯中不同的 Rashba 自旋轨道耦合强度（图中的  $\lambda_{BR}$ ；在论文中我们用  $\lambda_R$  标记）下（相对于内禀自旋轨道耦合强度），Dirac 点附近的能谱。图中动量空间的零点取在 Dirac 点， $\mathbf{k}$  为相对于 Dirac 点的动量（等价于前面一节中的  $\mathbf{q}$ ）。图中的点来自第一性原理计算，线是对点的拟合。实线代表自旋  $\eta = 1$  的一支，短划线代表自旋  $\eta = -1$  的一支。摘自文献 [378]。

可以写为 [319]

$$H_{so}^c = \zeta \nu(\mathbf{r})(\mu \sigma_x s_y - \sigma_y s_x) + \zeta' \mu \mathbf{b}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}. \quad (2.68)$$

这里第一项是 Rashba 型的自旋轨道耦合，其中  $\nu(\mathbf{r}) = \kappa_1(\mathbf{r}) + \kappa_2(\mathbf{r})$ ， $\kappa_1(\mathbf{r})$  和  $\kappa_2(\mathbf{r})$  是局部弯曲的两个主轴方向的曲率 [319]。第二项则为赝自旋空间对角的自旋轨道耦合， $\mathbf{b}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^2 \kappa_i(\mathbf{r})(\sin(2\theta_i), \cos(2\theta_i), 0)$ 。 $\theta_i$  是弯曲主轴与  $y$  轴的夹角，因而  $\theta_2 = \theta_1 \pm \pi/2$ 。参数  $\zeta = 0.15 \text{ meV nm}$ ， $\zeta' = 0.21 \text{ meV nm}$  [319]。在  $\kappa_1 = \kappa_2$  时，第二项消失。这可以理解为  $C_{3v}$  对称性仍满足，该项从对称性上是不允许存在的。而当  $\kappa_1 \neq \kappa_2$  时， $C_{3v}$  对称性进一步降低，导致第二项的出现。在沿着某一个方向呈现波纹状起伏的石墨烯中，第二项会很重要。在章节 7.2 中，我们会详细研究这种波纹状起伏的、因而存在上面第二项自旋轨道耦合的石墨烯中的自旋弛豫 [284]。

### 2.2.3 远离 Dirac 点的单带有效哈密顿量

实验上对石墨烯中的自旋弛豫和运输的研究大部分集中在远离 Dirac 点的区域，这是利用门电压的调控实现的。这里的远离是相对来说的，一般指离开 Dirac 点 100-300 meV 的位置，在那里线性色散关系仍能很好的满足。在该区域，我们只关注导带电子或者价带空穴，因而可以从描述两带（导带和价带）的哈密顿量 (2.66) 约化得到单带的哈密顿量。普遍采用的做法是，将描述动能部分的哈密顿量 (2.52) 对角化得到导带、价带的本征基函数，与自旋基函数直乘得到总的本征基函数，然后将总的哈密顿量 (2.66) 写到该基下，接着忽略两带之间的耦合，从而得到独立的描述导带和价带的有效哈密顿量。这种近似在电子（空穴）的费米能远远大于  $\lambda_R + \lambda_I$  时是成立的 [378]。考



考虑到石墨烯中弱的自旋轨道耦合以及实验中具有高达 100 meV 的费米能的情形，这种近似是合理的。

我们记哈密顿量 (2.52) 的本征值为  $\varepsilon_{\mu\nu\mathbf{q}} = \nu v_f |\mathbf{q}|$ ，这里  $\nu = \pm 1$  对应导带和价带。相应的本征矢为  $\psi_{\mathbf{q}}^{\mu\nu} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mu\nu e^{-i\mu\theta_{\mathbf{q}}}, 1)^T$ ，其中  $\theta_{\mathbf{q}}$  为矢量  $\mathbf{q}$  的幅角。引入基  $\Psi_{\mathbf{q}}^{\mu\nu} = \psi_{\mathbf{q}}^{\mu\nu} \otimes \chi_s$ ，其中  $\chi_s$  是自旋 Pauli 矩阵  $s_z$  的本征态。在这组基下，描述两个谷中远离 Dirac 点的电子的有效哈密顿量都可以写为 [246, 247]

$$H_{\nu}(\mathbf{q}) = \nu(v_f |\mathbf{q}| + \mathbf{\Omega}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{s}), \quad (2.69)$$

其中 Rashba 自旋轨道耦合提供的有效磁场为

$$\mathbf{\Omega}_{\mathbf{q}} = \lambda_R(-\sin \theta_{\mathbf{q}}, \cos \theta_{\mathbf{q}}, 0). \quad (2.70)$$

在图 2-5 中我们给出了导带中该有效磁场的示意图。注意它在两个能谷中相同，而同一个能谷中的价带的有效磁场的方向和导带的相反。该有效磁场的一个特征是它只依赖于动量的方向，而与模长没关系。这对于石墨烯中的自旋弛豫和自旋运输的性质非常重要。在第 7 以及 8 章中我们对于石墨烯的自旋弛豫和运输的研究，以及其它文献中对石墨烯中强简并电子系统的研究 [246, 247]，正是基于该有效哈密顿量。

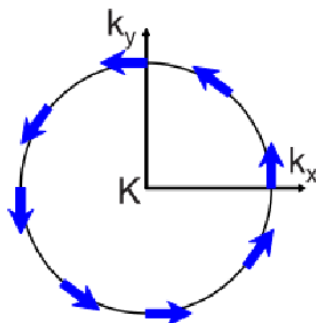


图 2-5: 石墨烯中 Dirac 点附近导带的 Rashba 自旋轨道耦合导致的有效磁场的示意图（两个能谷相同）。图中的  $\mathbf{k}$  等价于我们定义的  $\mathbf{q}$ 。摘自文献 [247]。

## 2.3 拓扑绝缘体

1980 年，量子霍尔效应的发现提供了与人们在那之前所知的物态在拓扑性质上不同的首例 [384]。处在量子霍尔态的系统的电导被精确量子化，只能是  $e^2/h$  的整数倍，而且在材料参数缓慢变化的时候，只要不出现量子相变，它就保持不变。霍尔电导其实是一个与材料的具体细节没有关系的拓扑不变量。由于磁场的存在，量子霍尔态属于时

间反演对称破缺的拓扑相。最近，一种新的拓扑量子态被理论预测和实验发现。这种拓扑量子态在时间反演下不变，而且自旋轨道耦合在其中扮演非常重要的角色。这种拓扑量子态存在于拓扑绝缘体的表面 [144–159]。和常见的绝缘体一样，拓扑绝缘体也有体的能隙，该能隙将最高的电子占据带和最低的电子空带分开。但是，不同于平庸的绝缘体，拓扑绝缘体必然有零能隙的表面态（若体为二维，则有零能隙的边界态）。而且，这个表面态是受时间反演对称性保护的。也就是说，它不被保持时间反演对称性不变的微扰所破坏。

二维的拓扑绝缘体（又称为量子自旋霍尔绝缘体）在概念上首先在石墨烯 [164] 和二维半导体 [165] 中提出。很快，它于 2006 年在 HgTe/CdTe 量子阱中被理论预测 [167]，2007 年被实验验证 [169, 385]。在量子阱的阱宽小于临界值（约为 6.3 nm）时，量子阱处于平庸的绝缘态；而当量子阱的阱宽大于该临界值时，量子阱处于拓扑上非平庸的绝缘态。在拓扑绝缘态，量子阱平面的边界上存在边界态，它传导具有特定极化的自旋流。这种边界态又被称为螺旋性的边界态（helical edge state）。四端的弹道输运测量也发现，在拓扑绝缘相，纵向的电导被量子化为  $2e^2/h$ （系数为 2，是因为有空间上分离的位置相对的两个边界态参与传导），与样品的宽度没有关系 [169]。也正是因此，二维拓扑绝缘体又被称为量子自旋霍尔绝缘体。

在二维拓扑绝缘体被实验发现之后，拓扑绝缘体的概念被迅速扩展到三维体系 [145, 386, 387]，并且在  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 、加了应力的 HgTe（体的 HgTe 本身是零带隙的半导体，必须加应力打开体的能隙）以及  $\alpha\text{-Sn}$  材料中被理论预测。紧接着，2008 年，Hsieh 等人从实验上报告了三维拓扑绝缘体在  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  ( $0.07 < x < 0.22$ ) 材料中的实现 [170]。三维拓扑绝缘体由四个  $Z_2$  拓扑不变量 ( $\nu_0; \nu_1\nu_2\nu_3$ ) 标记。 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  属于 (1;111) 的拓扑相，其表面态非常复杂（例如，沿着  $\Gamma$ - $M$  方向，表面态穿过费米面 5 次），而且体的能隙非常小 ( $< 50$  meV)。这促使人们进一步寻找具有简单描述的表面态和大的体能隙的拓扑绝缘体。很快，以  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  和  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  为代表的第二代三维拓扑绝缘体被发现 [146, 150, 153, 154, 388, 389]。和  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  不同，这一类拓扑绝缘体属于 (1;000) 拓扑相。尤其以  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  为典型，它们为针对拓扑绝缘相的实验研究提供了很好的参考材料。首先，这些材料是纯的化合物，而不是  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  的合金状态，因而原则上可以在高杂质浓度和低无序的条件下制备。其次，它们的表面态没有  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  的那么复杂。每一个表面上只有一个表面态，而且它在低能区可以很好地用 Dirac 锥形能带结构描述，具有 Rashba 型的自旋轨道耦合。最后，很重要的是，相对来说， $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  具有很大的体能隙，约在 300 meV 左右。在能隙中没有杂质带的情况下，这个大的能隙有助于在室温下体现出拓扑绝缘体表面态的性质，从而增大了实际应用的潜力。

三维拓扑绝缘体表面态的自旋螺旋性已经通过自旋—角度分辨的光电子谱实验验证 [154, 390]。对于拓扑绝缘体的理论研究有拓扑场论 [391] 和拓扑能带论 [100, 166, 386, 392, 393]。在没有相互作用的极限下，前者约化到后者。关于这两种理论以及它们的联系，可以参考评论文章 [148]。这里我们分别从二维和三维的体系出发，简要介绍描述拓扑绝缘体的有效模型和表面态的有效哈密顿量。

### 2.3.1 二维拓扑绝缘体

这里我们介绍二维拓扑绝缘体的第一个实例，HgTe/CdTe (001) 量子阱。HgTe 以及 CdTe 都具有闪锌矿体结构，因而同属  $T_d$  点群。CdTe 具有和 GaAs 类似的能带结构，其最低的导带是  $s$  型的  $\Gamma_6$  带，最高价带是  $p$  型的  $\Gamma_8$  带，带隙约为 1.6 eV。但是 HgTe 的能带结构和 CdTe 的很不一样。由于 Hg 原子很强的自旋轨道耦合，HgTe 的能带顺序被倒置： $\Gamma_8$  带处在  $\Gamma_6$  带的上面，因此，自旋 1/2 的  $\Gamma_8$  轻空穴带成为最低的导带，而自旋 3/2 的  $\Gamma_8$  重空穴带成为最高的价带。由于这两个带在  $\Gamma$  点简并，HgTe 又被称为零能隙的半导体。在图 2-6A 中，我们给出了 HgTe 和 CdTe 的能带结构示意图。

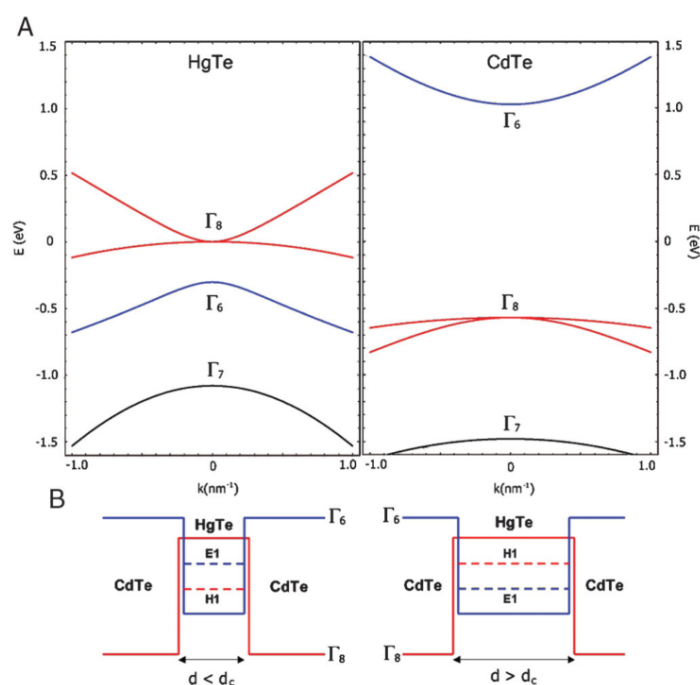


图 2-6: A: HgTe 和 CdTe 的能带结构示意图。B: 两种不同的阱宽下，HgTe/CdTe 量子阱结构以及最低子带的示意图。摘自文献 [148]。

#### 2.3.1.1 HgTe/CdTe 量子阱里二维电子气的有效模型

从体的 Kane 哈密顿量出发，利用前面 2.1.4 章节中介绍的微扰方法，可以得到描述 HgTe/CdTe 量子阱里二维电子气的有效哈密顿量。HgTe 以及 CdTe 都含有两种不同的原子，因而体的反演对称是破缺的，这会导致 Dresselhaus 自旋轨道耦合。为简单起见，在假设存在反演对称的情况下（忽略 Dresselhaus 自旋轨道耦合效应），而且只做最低阶（一阶）的微扰，在考虑了自旋的  $\Gamma_6$  最低电子子带  $E_1$  和  $\Gamma_8$  最低空穴子

带  $H_1$  构成的子空间中, Bernevig 等人在基  $\{|E_1+\rangle, |H_1+\rangle, |E_1-\rangle, |H_1-\rangle\}$  ( $\pm$  代表简并的自旋上和下) 下给出了描述该二维电子气的有效哈密顿量 [167]

$$H_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})I_{4 \times 4} + \begin{pmatrix} \mathcal{M}(\mathbf{k}) & Ak_+ & 0 & 0 \\ Ak_- & -\mathcal{M}(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathcal{M}(\mathbf{k}) & -Ak_- \\ 0 & 0 & -Ak_+ & -\mathcal{M}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.71)$$

这里  $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ ,  $\epsilon(\mathbf{k}) = C - D(k_x^2 + k_y^2)$ ,  $\mathcal{M}(\mathbf{k}) = M - B(k_x^2 + k_y^2)$ 。  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$  和  $M$  是依赖于量子阱结构的参数, 文献 [148] 给出了它们在几个典型量子阱宽下的值。常数  $C$  可以取为 0,  $A > 0$ ,  $B < 0$ ,  $D < 0$  [148]。  $2M$  代表了  $\Gamma$  点处  $E_1$  和  $H_1$  子带的能量差。在  $d < d_c \approx 6.3 \text{ nm}$  时  $M > 0$ ,  $E_1$  带处在  $H_1$  带的上面; 而当  $d > d_c$  时  $M < 0$ ,  $E_1$  子带处在  $H_1$  子带的下面 [148]。在图 2-6B 中, 我们给出了 HgTe/CdTe 量子阱结构以及最低子带的示意图。

### 2.3.1.2 HgTe/CdTe 量子阱的边界态

在实际样品中, 量子阱平面是有限的。假设上面给出的  $4 \times 4$  子带有效哈密顿量定义在  $x > 0$  的区域。我们可以利用与前面 2.1.4 章节中介绍的子带  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  方法类似的手段, 从该有效哈密顿量出发得到可能的边界态的有效哈密顿量 [148]。取  $\mathbf{k} = 0$  处的哈密顿量为  $H_0$ , 即  $H_0 = H_{\text{eff}}(\mathbf{k} = (-i\partial_x, 0))$ 。通过求解满足条件  $\Psi(x=0) = 0$  和  $\Psi(x \rightarrow +\infty) = 0$  的本征方程  $H_0\Psi(x) = E\Psi(x)$ , 可以得到局域在  $x = 0_+$  附近的边界态的包络函数在  $x$  方向的分量  $\Psi(x)$ 。由于  $H_0$  是块对角的,  $\Psi(x)$  有如下形式的解,

$$\Psi_{\uparrow}(x) = \begin{pmatrix} \psi_0(x) \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \Psi_{\downarrow}(x) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \psi_0(x) \end{pmatrix}, \quad (2.72)$$

其中  $\mathbf{0}$  是两分量矢量。  $\psi_0(x)$  满足方程

$$\begin{pmatrix} M + (D + B)\partial_x^2 & -iA\partial_x \\ -iA\partial_x & -M + (D - B)\partial_x^2 \end{pmatrix} \psi_0(x) = E\psi_0(x). \quad (2.73)$$

文献 [148] 在忽略  $D$  的贡献的情况下, 在条件  $M/B > 0$  下, 找到了能量  $E = 0$  对应的边界态,  $\psi_0(x) = (e^{\lambda_1 x} - e^{\lambda_2 x})\phi_-$ 。这里  $\lambda_{1,2} = \frac{1}{2B}(A \pm \sqrt{A^2 - 4MB})$ , 同时小于 0。  $\phi_-$  是 Pauli 矩阵  $\tau_y$  本征值为  $-1$  的本征态,  $\tau_y\phi_- = -\phi_-$ 。将体的哈密顿量 (2.71) 投影到边界态  $\{\Psi_{\uparrow}(x), \Psi_{\downarrow}(x)\}$  构成的子空间下, 保留动量的最低阶, 可以得到

描述边界态的有效哈密顿量 [148]

$$H_{\text{edge}}(k_y) = Ak_y\sigma_z. \quad (2.74)$$

可以看见，该边界态是一种自旋-动量锁定的态，且具有线性能谱。图 2-7 给出了在有限宽度的带状区域对哈密顿量 (2.71) 严格数值对角化得到的体态和边界态的能谱 [148]。(a) 对应窄的量子阱，(b) 对应宽的量子阱。在宽的 HgTe/CdTe 量子阱中可以清楚的看见边界态的存在。边界态的费米速度  $v = A/\hbar \approx 5.5 \times 10^5$  m/s [148]。需要指出的是，在考虑了体的反演对称破缺（因此包含了 Dresselhaus 自旋轨道耦合）[163, 394]，甚至在具有 Rashba 自旋轨道耦合的非对称 HgTe/CdTe 量子阱中 [395]，拓扑绝缘相也被研究。

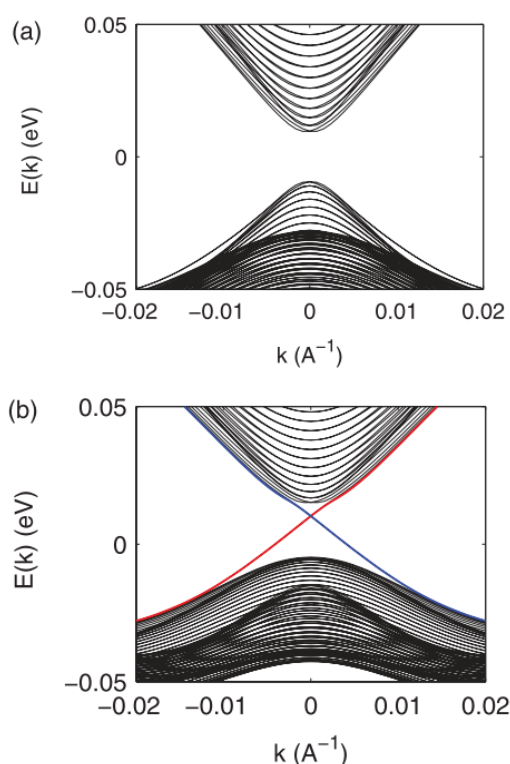


图 2-7: 在有限宽度的带状区域对哈密顿量 (2.71) 严格数值对角化得到的体的能谱和边界态。(a): 窄的量子阱，没有边界态。(b): 宽的量子阱，体能隙中的线性能谱对应边界态。摘自文献 [148]。

和量子霍尔效应类似，在拓扑绝缘相，弹道运输的边界态会贡献量子化的电导。在实验上，当费米面处于体的能隙中时，这个量子化的霍尔电导可以被测量到。König 等人首先在实验上测得了由边界态贡献的量子霍尔电导 [163]。由于两个相对的边界态都会对电导有贡献，所以在大阱宽的量子阱中，测得的量子化的电导是  $2e^2/h$ 。图 2-

8 的左图给出了霍尔电导测量结构以及边界态的传导示意图，右图给出了不同条件下 HgTe/CdTe 量子阱四端电阻对门电压的依赖。从右图中可以看见，在大阱宽的小尺寸样品中（III 和 IV）， $2e^2/h$  的霍尔平台可以很清楚的看见。而当样品长度足够大（尺度大于电子的非弹性散射平均自由程，如在样品 II 中）时，非弹性散射的存在使得电导下降。

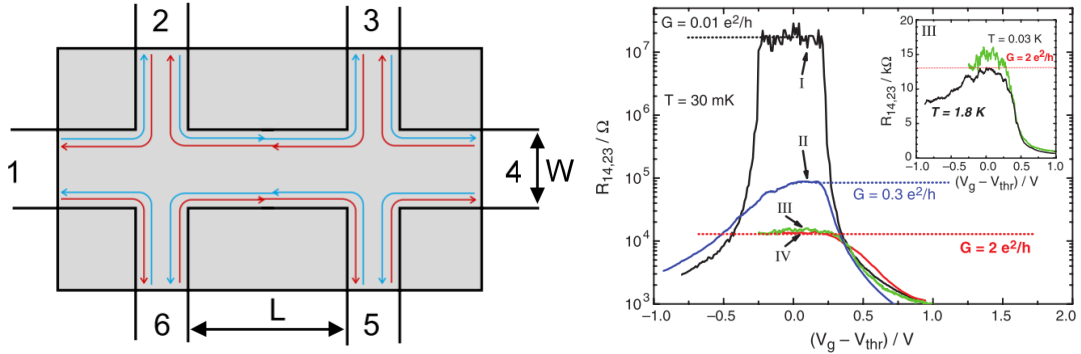


图 2-8: 左图: 霍尔电导测量结构以及边界态的传导示意图。阴影区代表载流子类型和浓度可以被门电压调控的区。摘自文献 [163]。右图: 不同条件下 HgTe/CdTe 量子阱四端电阻对门电压的依赖。样品 I 对应正常相 ( $d = 5.5$  nm), II-IV 对应拓扑绝缘相 ( $d = 7.3$  nm)。温度  $T = 30$  mK。没有外磁场。样品 I-II 的尺寸为  $(20 \times 13.3) \mu\text{m}^2$ , 样品 III 的尺寸为  $1.0 \times 1.0 \mu\text{m}^2$ , 样品 IV 的尺寸为  $1.0 \times 0.5 \mu\text{m}^2$ 。插图中给出了和样品 III 同尺寸在另两个不同温度下的对应曲线。摘自文献 [169]。

上面在求解边界态的时候利用了半无限大的模型。实际的样品宽度是有限的，具有带状的结构。Zhou 等人从体的哈密顿量 (2.71) 出发，在有限的带状结构中严格解析求解了边界态 [396]。他们的解表明，在有限宽的样品中，两个边界上的边界态会发生耦合，从而在 Dirac 点处打开能隙。这个能隙随着样品的宽度的增大而指数减小。如果费米面落在能隙中，则上面指出的量子化的自旋霍尔电导将消失。图 2-9 的左图 (a) 给出了不同宽度的 HgTe/CdTe 量子阱中的边界态，(b) 给出了能隙  $\Delta$  随着样品宽度的变化。根据 Landauer-Büttiker 公式 [397]，在能隙存在的情况下，弹道运输的电导为  $G(\Delta) = \frac{2e^2}{h} \left[ \frac{1}{e^{(\Delta/2 - \mu)/k_B T} + 1} - \frac{1}{e^{(-\Delta/2 - \mu)/k_B T} + 1} + 1 \right]$  (这里能量零点取为能隙的中点) [396]。因而，在低温和较高费米面 (注意不能进入体态) 的情况下，电导趋向于  $2e^2/h$ 。图 2-9 的右图给出了 200 nm 宽度的样品在两个低温下的电导对化学势的依赖。

### 2.3.2 三维拓扑绝缘体

三维拓扑绝缘体的四个  $Z_2$  拓扑不变量  $(\nu_0; \nu_1 \nu_2 \nu_3)$  中， $\nu_0$  标记费米面所包围的 Kramers 简并的 Dirac 点的数目的奇偶性 [148]。 $\nu_0 = 1$  时，费米面所包围的 Kramers 简

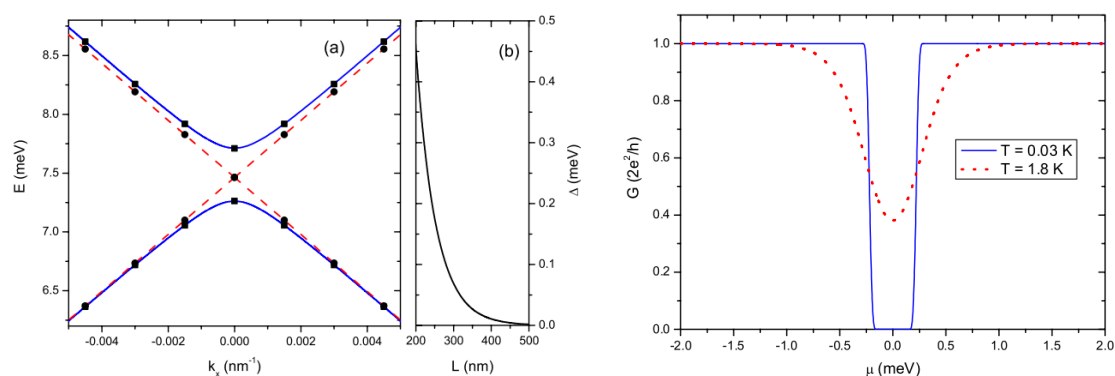


图 2-9: 左图: (a) 在样品宽度  $L = 200 \text{ nm}$  (实线) 和  $1000 \text{ nm}$  (虚线) 时, HgTe/CdTe 量子阱边界态的色散关系。图中的点来自进束缚近似下的结果。(b) 能隙  $\Delta$  对样品宽度  $L$  的依赖关系。右图:  $200 \text{ nm}$  宽度的样品在两个低温下的电导对化学势的依赖。摘自文献 [396]。

并的 Dirac 点的数目为奇数, 这时的拓扑绝缘体称为强的拓扑绝缘体, 表面态受时间反演对称性保护。强的三维拓扑绝缘体的代表有  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  和  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ , 它们的表面态都只有一个 Dirac 点。而当  $\nu_0 = 0$  时, 费米面所包围的 Kramers 简并的 Dirac 点的数目为偶数, 这时的拓扑绝缘体称为弱的拓扑绝缘体, 表面态不受时间反演对称性保护。多层二维拓扑绝缘体的堆叠即形成弱的三维拓扑绝缘体。在这里我们以研究比较广的、表面态具有很好的解析描述的第二代三维拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  为例, 对描述三维拓扑绝缘体的有效模型和表面态的有效哈密顿量做简单介绍。

### 2.3.2.1 三维拓扑绝缘体 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 的有效模型

$\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  和  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  都具有三角晶系结构, 属于  $D_{3d}^5$  点群。图 2-10(a) 给出了  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的晶格结构 [398], 其沿着  $z$  方向层状堆叠。每一层的原子构成平面内的六角晶格, 但是所占据的位置不一样。沿着  $z$  轴看, 每一层原子可以占据  $A$ 、 $B$  和  $C$  三种位置 [图 2-10(c)]。每一个原胞有 5 个原子 (2 个 Bi 原子和 3 个 Se 原子)。该晶体结构具有中心反演对称性。以图中所示的 Se2 原子为中心, Bi1 (Se1) 与 Bi1' (Se1') 原子关于其中心反演对称。因而 Bi1 (Se1) 与 Bi1' (Se1') 原子等价。

在考虑了化学成键、晶体场和自旋轨道耦合后,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  中  $\Gamma$  点的四个  $p$  型低能态为  $\{|P1_z^+, \uparrow\rangle, |P2_z^-, \uparrow\rangle, |P1_z^+, \downarrow\rangle, |P2_z^-, \downarrow\rangle\}$  [图 2-11(a)]。这里  $\pm$  表示波函数在空间的宇称。在这四个带构成的子空间里描述电子的有效哈密顿量可以从对称性分析或者微扰

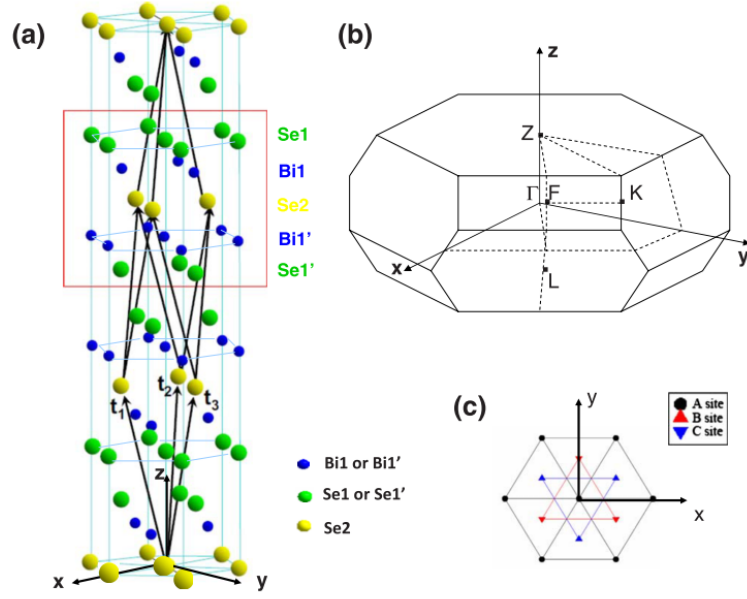


图 2-10: (a) Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的晶格结构,  $z$  轴沿着三重旋转对称轴。 $\mathbf{t}_{1,2,3}$  是基矢。(b) Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的布里渊区。(c) 每一个原子层构成的六角晶格中原子的三种可能位置。摘自文献 [398]。

的  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  方法得到 [398]。在这里我们给出在  $\Gamma$  点附近保留到动量的二阶的形式 [148],

$$H_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})I_{4 \times 4} + \begin{pmatrix} \mathcal{M}(\mathbf{k}) & A_1 k_z & 0 & A_2 k_- \\ A_1 k_z & -\mathcal{M}(\mathbf{k}) & A_2 k_- & 0 \\ 0 & A_2 k_+ & \mathcal{M}(\mathbf{k}) & -A_1 k_z \\ A_2 k_+ & 0 & -A_1 k_z & -\mathcal{M}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.75)$$

其中  $\epsilon(\mathbf{k}) = C + D_1 k_z^2 + D_2 (k_x^2 + k_y^2)$ ,  $\mathcal{M}(\mathbf{k}) = M - B_1 k_z^2 - B_2 (k_x^2 + k_y^2)$ 。这里所涉及的参数可以通过用该哈密顿量得到的能谱去拟合第一性原理的计算结果而得到。文献 [398] 给出了 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>、Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 以及 Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 中各参数的值, 其中  $B_1 < 0$ 。参数  $2M$  代表了  $\Gamma$  点处  $|P1_{z^+}, \uparrow(\downarrow)\rangle$  能级和  $|P2_{z^-}, \uparrow(\downarrow)\rangle$  能级的能量差。由于 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>、Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 以及 Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 中大的自旋轨道耦合,  $|P1_{z^+}, \uparrow(\downarrow)\rangle$  能级被降到  $|P2_{z^-}, \uparrow(\downarrow)\rangle$  之下 (图 2-11(b)), 因而  $M < 0$ 。

### 2.3.2.2 三维拓扑绝缘体 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的表面态: 不变量方法

在有实际表面边界 [比如,  $z = 0$  的 (111) 平面] 存在的情况下, 和前面对二维拓扑绝缘体的处理类似, 我们可以先求解出  $\Gamma$  点处可能的低能表面态, 然后将体的有效哈密顿量投影到低能表面态构成的子空间, 从而得到二维表面态的有效哈密顿量。在满足条件  $M/B_1 > 0$  的情况下, 可以得到零能的表面态。在保留动量的一阶时, 其有效哈



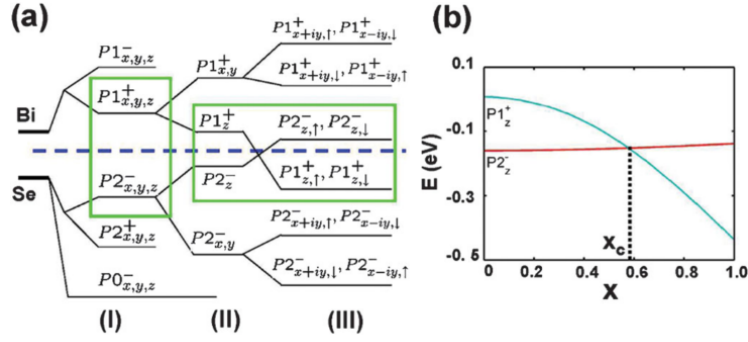


图 2-11: (a) 从 Bi 和 Se 原子的  $p$  轨道组成  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  在  $\Gamma$  点的导带和价带的示意图。图中的 (I)、(II) 和 (III) 阶段分别代表考虑进化学成键、晶体场和自旋轨道耦合的效应。水平的短划线代表费米能。(b) 在手动调节原子自旋轨道耦合强度的情况下,  $\lambda(\text{Bi}) = x\lambda_0(\text{Bi}) = 1.25x$  eV 以及  $\lambda(\text{Se}) = x\lambda_0(\text{Se}) = 0.22x$  eV,  $\Gamma$  点处  $|P1_z^+\rangle$  和  $|P2_z^-\rangle$  能级的变化。摘自文献 [148]。

密顿量为 [148]

$$H_{\text{surf}}(k_x, k_y) = A_2(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y). \quad (2.76)$$

这个哈密顿量描述的是一个无质量的 Dirac 锥形的线性能带结构。对于  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , 费米速度  $v = A_2/\hbar \approx 5 \times 10^5$  m/s [146, 151]。在包含进动量的高阶项后, 该哈密顿量关于  $z$  轴的连续旋转对称降为绕  $z$  轴的 3 重旋转对称, 同时非零的有效质量也被引入 [398, 399]。需要指出的是, 从体的有效哈密顿量 (2.75) 出发, 在比较薄的样品中考虑两个相对的表面后, Lu 等人发现, 和带状的 HgTe 量子阱中的情形类似, 两个表面态会发生耦合, 在 Dirac 点打开能隙, 并引入非零的有效质量 [400]。另外,  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  虽然具有和  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  一样的晶格结构, 但是它的自旋轨道耦合比较弱, 不能导致费米面的上、下两个宇称相反的能带的倒置, 也即参数  $M > 0$ , 因而没有表面态的存在。

除了将  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  体哈密顿量投影到  $\Gamma$  点的表面态子空间得到表面的二维有效哈密顿量这一方法外, 基于对称性分析的不变量方法 [337, 401] 也可以直接得到描述表面态的有效哈密顿量 [399]。不变量方法构造哈密顿量的基本思想基于哈密顿量在晶体空间群的群元操作下的不变性。此外, 如果没有外加磁场, 哈密顿量还必须满足时间反演对称性。 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  在存在  $z = 0$  的表面时, 对称性由  $C_{3v}$  点群描述。 $C_{3v}$  群的各个不可约表示的特征标表和相应的基函数在表 2-3 中给出。在  $\Gamma$  点, 由于时间反演的对称性, 电子的两个不同自旋态是简并的, 因而表面电子态由二维不可约表示  $\Lambda_3$  描述。基于特征标表, 我们可以把直乘  $\Lambda_3 \otimes \Lambda_3$  分解为不可约表示的直和:

$$\Lambda_3 \otimes \Lambda_3 = \Lambda_1 \oplus \Lambda_2 \oplus \Lambda_3. \quad (2.77)$$

	$\{E\}$	$\{2C_3\}$	$\{3m\}$	Basis functions
$\Lambda_1$	1	1	1	$1; k_x^2 + k_y^2$
$\Lambda_2$	1	1	-1	$\sigma_z$
$\Lambda_3$	2	-1	0	$\{k_x, k_y\}; \{-\sigma_y, \sigma_x\}$

表 2-3:  $C_{3v}$  群的不可约表示的特征标表和基函数。

	$\Lambda_1(S')$	$\Lambda_2(L'_z)$	$\Lambda_3(\{A'_x, A'_y\})$
$\Lambda_1(S)$	$SS'[\Lambda_1]$	$SL'_z[\Lambda_2]$	$\{SA'_x, SA'_y\}[\Lambda_3]$
$\Lambda_2(L_z)$		$L_zL'_z[\Lambda_1]$	$\{L_zA'_x, L_zA'_y\}[\Lambda_3]$
$\Lambda_3(\{A_x, A_y\})$			$A_xA'_x + A_yA'_y[\Lambda_1]; A_xA'_y - A_yA'_x[\Lambda_2];$ $\{A_xA'_y + A_yA'_x, A_xA'_x - A_yA'_y\}[\Lambda_3]$

表 2-4:  $C_{3v}$  群的不可约表示的基函数的乘法表。

我们需要从右边的三个不可约表示  $\Lambda_1$ ,  $\Lambda_2$  和  $\Lambda_3$  的基函数构造出恒等表示  $\Lambda_1$  的基函数。恒等表示的基函数在各个群元的操作下必定是不变的, 即所谓的不变量。满足时间反演对称的这些不变量就是表面电子态的哈密顿量中允许存在的项 (如果从包含进了时间反演操作的双群出发, 得到的不变量自然是满足时间反演对称的)。

不可约表示的基函数不是唯一的。在取  $x$  轴沿着  $\Gamma$ - $M$  方向时, 表 2-3 中给出了各个不可约表示的几个典型的基函数。更多的基函数可以利用不可约表示的基函数的“乘法表” (表 2-4<sup>②</sup>) 获得。这里对表 2-4 作一下简单的说明。表中左边栏和顶部栏为三个不可约表示, 圆括弧里的符号标记其基函数。不可约表示的直乘分解为直和时给出不可约表示的新的基函数。乘法表里的“乘积”即为这些新的基函数, 方括弧里的标注表示这些基函数所属的不可约表示。举例说明一下, 由方程 (2.77), 我们可以从不可约表示  $\Lambda_3$  的两组基函数  $\{A_x, A_y\}$  和  $\{A'_x, A'_y\}$  出发得到不可约表示  $\Lambda_1$ ,  $\Lambda_2$  和  $\Lambda_3$  的新的基函数。如表所示,  $\Lambda_1$  表示的新的基函数为  $A_xA'_x + A_yA'_y$ 。利用这个乘法表, 我们可以得到无穷多的基函数, 它们关于动量的阶数越来越高。也就是说, 我们可以得到对动量  $\mathbf{k}$  任意阶依赖的项。现在我们保留到  $\mathbf{k}$  的三阶, 恒等表示  $\Lambda_1$  的基函数有

$$1, k_x^2 + k_y^2, -k_x\sigma_y + k_y\sigma_x, k^2(-k_x\sigma_y + k_y\sigma_x), (k_x^2 - k_y^2)\sigma_x - 2k_xk_y\sigma_y, (-k_y^3 + 3k_x^2k_y)\sigma_z. \quad (2.78)$$

注意到其中的第一项常数 1 无关紧要, 只是影响能量零点的取定。第五项  $(k_x^2 - k_y^2)\sigma_x - 2k_xk_y\sigma_y$  不满足时间反演对称的要求, 故排除掉。剩下的几项是哈密顿量里允许的项。将它们线性叠加则得到哈密顿量

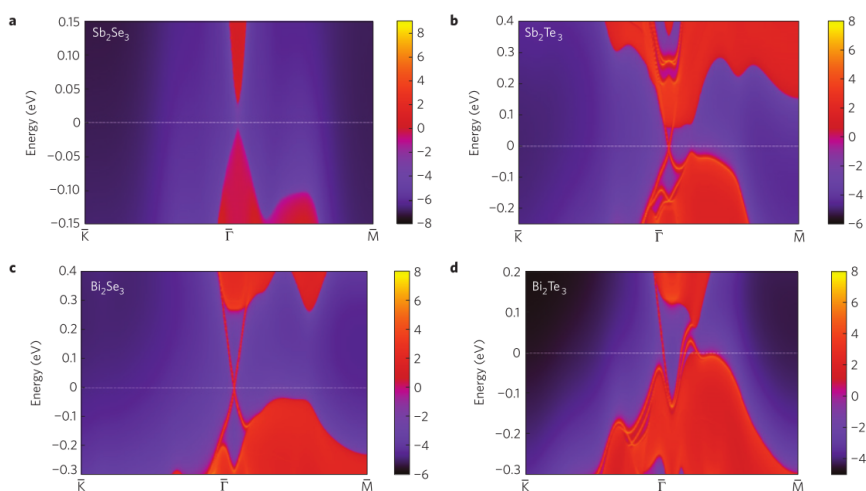
$$H(\mathbf{k}) = a(1 + bk^2)(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x) + ck^2 + d(-k_y^3 + 3k_x^2k_y)\sigma_z. \quad (2.79)$$

<sup>②</sup>这个乘法表由 Ivchenko 教授在授课讲义中给出。

如果我们取定坐标系的  $x$  轴为  $\Gamma$ - $K$  方向, 则

$$H(\mathbf{k}) = a(1 + bk^2)(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x) + ck^2 + d(k_+^3 + k_-^3)\sigma_z, \quad (2.80)$$

这正是文献 [398, 399] 中所给出的形式。系数  $a$ 、 $b$ 、 $c$  和  $d$  需要通过与实验或者第一性原理计算的结果做比较来确定。在  $\Gamma$  点附近, 如果只保留  $\mathbf{k}$  的线性项, 就得到哈密顿量 (2.76)。



**图 2-12:** 具有 (111) 表面的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  (a)、 $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  (b)、 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  (c) 以及  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  (d) 中局域态密度对能量和动量的依赖。红色区域代表体的能带而蓝色区域代表体的能隙。在  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 、 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  以及  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  中, 表面态由体能隙中的红线表示。 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  由于自旋轨道耦合弱, 体中没有能带反转, 因而没有表面态。摘自文献 [146]。

图 2-12 给出了具有 (111) 表面的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  族材料的局域态密度对能量和动量的依赖 [146]。红色区域代表体的能带而蓝色区域代表体的能隙。在  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 、 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  以及  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  中, 表面态由体能隙中的红线表示。前面已经提到,  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  由于自旋轨道耦合弱, 体中没有能带反转, 因而没有表面态。图 2-13 中给出了  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的表面态在  $\Gamma$  点附近的能带结构及自旋极化 (箭头) 的示意。从 2-13(b) 可以看见, 在大的动量范围内, 能带结构显现出三重旋转对称。

最后需要指出的是, 前面所给出的三维拓扑绝缘体的表面态是 (111) 切割面上的。实际上, 三维拓扑绝缘体的表面态的 Dirac 点的能量位置、能带的弯曲形态以及自旋极化的特征是依赖于切割面的晶面方向的。Zhang 等人研究了三维拓扑绝缘体表面态对晶向的依赖 [402]。他们发现, Dirac 点的能量位置由体结构在垂直表面方向对电子-空穴带的对称性的破坏决定, 而且可以通过保持时间反演对称性的表面势进行调控 [402]。

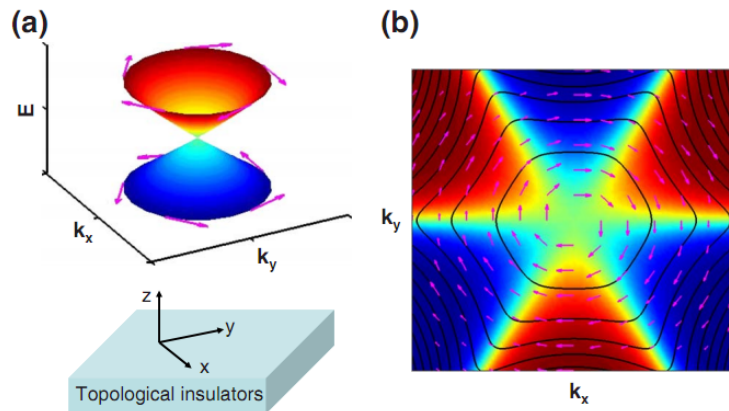


图 2-13: (a)  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的表面态在  $\Gamma$  点附近的能带结构及自旋极化（箭头）示意图。(b) 导带电子态的自旋极化的俯视图。箭头表示  $x$ - $y$  平面内的分量。颜色表示  $z$  分量，红（蓝）色表示沿正（负） $z$  分量。摘自文献 [398]。

## 2.4 多铁材料

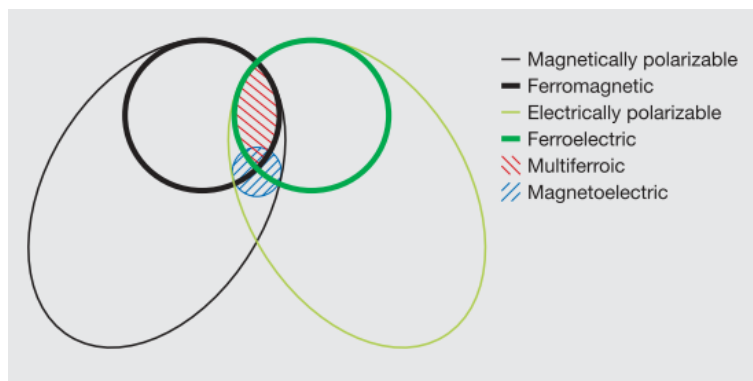


图 2-14: 多铁材料和磁电耦合之间的关系。铁磁性（铁电性）材料形成磁（电）可极化的材料的子集。铁磁和铁电材料的交集（红色阴影区）代表多铁材料。蓝色阴影区代表磁电耦合，它是独立的现象，可以（但非必须）在任何可以同时磁（电）极化的材料中存在。摘自文献 [403]。

多铁材料（multiferroic materials）是同时具有多种铁性的材料。常见的铁性包括铁电性、铁磁性、铁弹性和铁涡性。但是，多铁材料一般对铁弹性不做要求。此外，多铁的定义也被扩展为将反铁性（反铁磁性、反铁电性）包含进来。具有铁电性的磁性材料同时破坏了空间反演和时间反演对称性。需要指出的是，为了具有铁电性，材料必须是绝缘的，否则巡游的电子会将电极化屏蔽掉。多铁材料的重要性质是其中的磁电耦合。磁电耦合可以是两个序参量的直接耦合，也可以是通过应力的间接耦合。图 2-14 给出了磁电耦合和多铁材料之间的关系 [403]。具有磁电耦合的多铁材料具有很广阔的应

用前景。但是，由于在很多凝聚态物质中磁性和铁电性难以共存，多铁材料的匮乏阻碍了对其进一步的研究。直到 2003 年，可用磁场调控电极化的钙钛矿（perovskite）氧化物  $\text{TbMnO}_3$  以及具有很大电极化的  $\text{BiFeO}_3$  薄膜的发现，使得这个领域开始复苏 [404, 405]。关于多铁材料方面的研究，可以参考一些评论文章 [161, 406–416]。

### 2.4.1 多铁材料的分类与铁电机制

Khomskii 将多铁材料分为两类 [407]。第一类多铁材料里铁电性和磁性的来源不一样，各自在很大程度上独立的出现，尽管两者之间有一些弱的耦合。这些材料中，比起磁性，铁电性通常可以在更高的温度下出现，而且电极化非常强（ $10\text{--}100 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  的量级）。这类多铁材料的典型例子为  $\text{BiFeO}_3$  ( $T_{FE} \sim 1100 \text{ K}$ ,  $T_N = 643 \text{ K}$ ,  $P \sim 90 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ ) 和  $\text{YMnO}_3$  ( $T_{FE} \sim 914 \text{ K}$ ,  $T_N = 76 \text{ K}$ ,  $P \sim 6 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ )。第二类多铁材料则具有强的磁电耦合，铁电性由磁性产生。但是，这类材料里的电极化强度通常非常小（ $10^{-2} \mu\text{C}/\text{cm}^2$  的量级）。这类材料的典型代表有  $\text{TbMnO}_3$ 、 $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_6$  以及  $\text{MnWO}_4$  等。

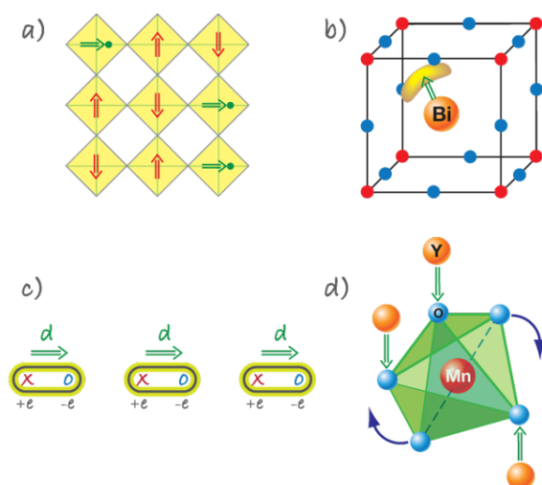


图 2-15: 第一类多铁材料里不同的铁电微观机制 [407]。(a) 同时具有  $d$  轨道空的离子（绿点）和  $d$  轨道部分占据的离子（红色）的“混合”的钙钛矿。 $d$  轨道空的离子偏离  $\text{O}_6$  正八面体（黄色区域）中心的位移提供电极化，与磁性共存。(b)  $\text{BiFeO}_3$  和  $\text{PbVO}_3$  中， $\text{Bi}^{3+}$  和  $\text{Pb}^{2+}$  离子（橘色）上的孤立电子对（黄色区）的有序排列形成电极化（绿色箭头）。(c) 不等价的原子带不等量的电荷形成电荷序，提供电极化。(d)  $\text{YMnO}_3$  中几何驱动产生电极化。摘自文献 [407]。

对于第一类多铁材料，铁电性的来源机制有多种 [407]。在钙钛矿氧化物中，存在很多铁电性材料，典型的如  $\text{BaTiO}_3$  和  $\text{PbTiO}_3$ 。同时钙钛矿氧化物中也有很多磁性材料。但是同时具有磁性和铁电性的多铁材料却不多见。这是因为，铁电性来源于  $d$  轨道空占据的过渡金属离子如  $\text{Ti}^{4+}$  偏离  $\text{O}_6$  正八面体中心的位移，但是磁性则要求过渡金属离子的  $d$  轨道有部分占据。解决这个矛盾的一种可能的方案是由  $d$  轨

道空的离子供铁电性，而由  $d$  轨道部分占据的其它离子提供磁性 [图 2-15(a)]。当然，其它多铁材料给出了不同的铁电机理。比如，对于含有 Bi 或者 Pb 的多铁材料，如  $\text{BiFeO}_3$  和  $\text{PbVO}_3$ ， $\text{Bi}^{3+}$  和  $\text{Pb}^{2+}$  对铁电性质的出现至关重要 [405]。在这些离子中，最外层有一对“孤立”的电子没有参与成键，而且这些孤立电子对在一个方向上排列，从而提供电极化 [图 2-15(b)]。此外，电荷序也是产生铁电的原因 [图 2-15(c)]。  $\text{Pr}_{1/2}\text{Ca}_{1/2}\text{MnO}_3$  [417] 以及  $\text{RNiO}_3$  [408] 中的铁电性就来源于此。对于  $\text{YMnO}_3$  [418, 419]，电极化由几何驱动产生 [图 2-15(d)]。为了形成更紧致的堆叠， $\text{MnO}_5$  多面体结构会发生倾斜，使得氧离子更加接近 Y 离子，并使得 Y 离子发生位移。这种氧离子和 Y 离子的位移导致电极化。

第二类的多铁材料，铁电由磁结构产生，只出现在特定的磁有序区。有的材料，如  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ ，铁电性与共线 (collinear) 的磁结构共存 [420]。而更多情况则是，铁电性与螺旋 (spiral) 的磁结构共存。  $\text{TbMnO}_3$  是典型的代表。此外， $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_6$ 、 $\text{MnWO}_4$  等也属于这一类多铁材料。

在这里，我们主要对多铁材料  $\text{TbMnO}_3$  给一个简单的介绍。

### 2.4.2 $\text{TbMnO}_3$ 的多铁性

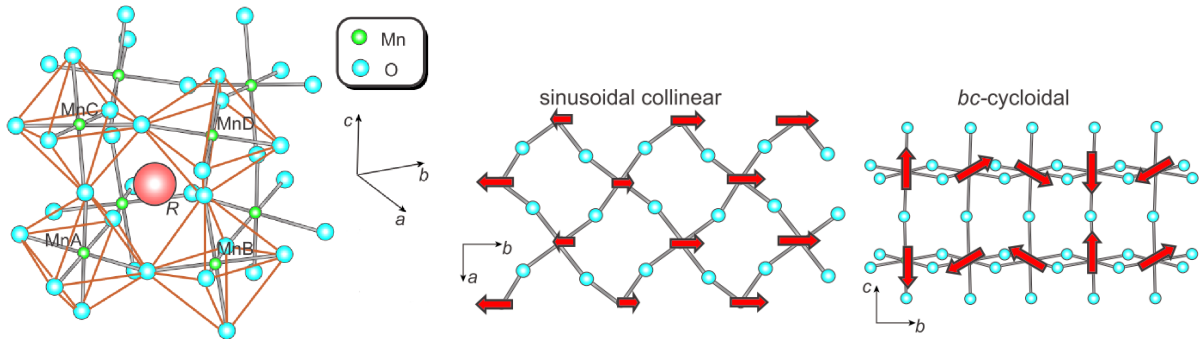


图 2-16: 左图:  $\text{RMnO}_3$  的晶格结构示意图。右图: 第一幅图, 沿着  $b$  方向的构型磁构型; 第二幅图,  $b$ - $c$  平面内的螺旋磁矩构型。摘自文献 [421]。

$\text{RMnO}_3$  ( $R=\text{La}, \dots, \text{Lu}$ , 为镧系原子) 属于斜方晶系, 图 2-16 的左图给出了这类材料的晶格结构 [421]。  $\text{O}_6$  八面体具有一定的扭曲, 中心  $R$  原子越小扭曲程度越大。在  $R$  为  $\text{Tb}$  和  $\text{Dy}$  时, 扭曲程度中等, 在一定温度下可以出现铁电性。对于  $\text{TbMnO}_3$ , 在温度低于  $T_{N1} = 41 \text{ K}$  时,  $\text{TbMnO}_3$  出现磁有序,  $\text{Mn}^{3+}$  离子的磁矩沿着  $b$  方向共线排列 (图 2-16 的右边的第一幅图)。当温度低于  $T_{N2} = 27 \text{ K}$  时, 磁有序变成  $b$ - $c$  平面内的螺旋形式 (图 2-16 的右边的第二幅图), 同时沿着  $c$  方向会有电极化出现 (图 2-17), 只不过这个电极化非常小。如果设定坐标系为  $\hat{x} = \hat{b}$ ,  $\hat{y} = -\hat{a}$  以及  $\hat{z} = \hat{c}$ , 则螺旋的磁矩为  $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = M_x \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})\hat{x} + M_z \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})\hat{z}$ , 其中  $\mathbf{q} = (0.27 \times \frac{2\pi}{b}, 0, \frac{2\pi}{c})$  是

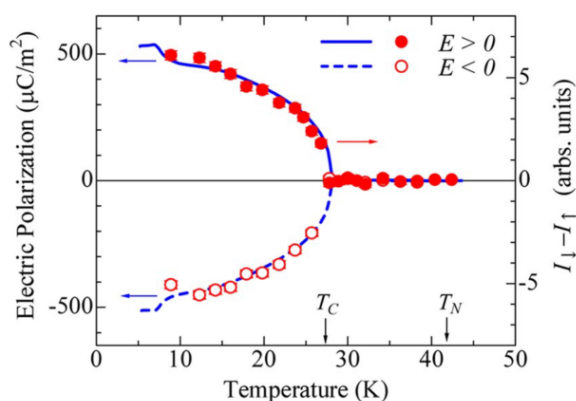


图 2-17: 在沿着  $c$  但方向不同的冷却电场  $E > 0$  和  $E < 0$  下, 电极化随着温度的依赖。摘自文献 [422]。

调制波矢。这里  $\text{TbMnO}_3$  的晶格常数  $b = 0.586 \text{ nm}$  和  $c = 0.749 \text{ nm}$  [423]。实际上  $M_x \neq M_z$  (例如, 在  $T = 15 \text{ K}$  时,  $M_x/M_z \approx 1.4$ ) [422–425], 但是为方便理论模型的建立和处理, 常采用近似  $M_x \approx M_z = M$  [426, 427]。需要指出的是, 由于强的磁电耦合,  $\text{TbMnO}_3$  里电的极化方向可以通过外加磁场来改变 [404], 同时磁矩螺旋的手征性也可以通过外加电场来调控 [422, 428]。

对于  $\text{TbMnO}_3$  里螺旋磁矩的来源有比较多的理论研究 [421, 429–431]。其中, 包含了最近邻铁磁耦合、次近邻反铁磁耦合、单离子各向异性、Dzyaloshinsky-Moriya 相互作用 [432, 433]、晶体场作用的微观自旋模型, 可以很好地给出实验上在不同条件下所测得磁性结构 [421]。但是,  $\text{TbMnO}_3$  里铁电性的来源, 却比较有争议。Katsura, Nagaosa 以及 Balatsky 从一个微观模型 (KNB 模型) [434] 给出在螺旋磁矩构型下, 电极化为

$$\mathbf{P} \sim \mathbf{e}_{i,i+1} \times (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}). \quad (2.81)$$

这里  $\mathbf{e}_{i,i+1}$  是连接两个相邻自旋  $\mathbf{S}_i$  和  $\mathbf{S}_{i+1}$  的单位矢量。这种微观机制与自旋轨道耦合有关系 [434], 而且在它框架下电极化实际上是由电子在空间的非对称分布导致的。还有一种观点认为电极化由 Dzyaloshinsky-Moriya 相互作用导致的离子位移产生 [430, 435]。Malashevich 和 Vanderbilt 利用第一性原理计算发现, 电极化主要由离子位移贡献。电子贡献的电极化非常的微弱, 而且方向与 KNB 模型所给出的相反 [425]。2011 年, Walker 等人通过 X 光吸收的精细结构谱, 测量了离子的高精度 (飞米量级) 位移, 支持了离子实位移贡献电极化的这一模型 [436]。

### 2.4.3 多铁氧化物界面的二维电子系统

多铁材料在自旋电子学领域里有潜在的广阔应用 [161]。一种可能的应用是磁电

随机存储器。由于多铁材料中磁和电都可以实现极化，这种磁电随机存储器有望实现四位的存储 [437]，这不同于常用的两位的铁随机存储器与磁随机存储器，因而有助于提高存储密度。另一方面，如果磁电耦合很强，磁和电的自由度可能不能够独立调控。但是这反而又为通过电压的方法写数据提供了一种可能 [438]，从而有助于降低能耗。此外，由于多铁材料的绝缘性，它们还可以用作磁隧穿结，而且能提供很大的磁阻 [162]。

多铁材料和其它材料的结合有可能让其性质得到更充分的利用。最近，Jia 和 Berakdar 提出了一种  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3/\text{TbMnO}_3$  的三层结构 [426,427]，尝试利用  $\text{TbMnO}_3$  的磁性质来影响  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处的二维电子系统的自旋动力学，以寻求新的特性和一些功能性的应用。 $\text{LaAlO}_3$  和  $\text{SrTiO}_3$  也是绝缘体氧化物，但是在它们的界面处能够形成迁移率高达  $10^4 \text{ cm}^2/(\text{V s})$  [439–441] 的二维电子气。这些电子被认为是界面处电子分布的重构以及  $\text{SrTiO}_3$  中的氧空位产生的 [439,442–444]。此外，由于界面导致的结构反演对称破缺会在该二维电子气中产生 Rashba 自旋轨道耦合 [445–448]。Jia 和 Berakdar 的模型假设，在  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3/\text{TbMnO}_3$  的中间层  $\text{SrTiO}_3$  很薄（有限的几个原子层）时， $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处的二维电子气与  $\text{SrTiO}_3/\text{TbMnO}_3$  界面附近  $\text{TbMnO}_3$  中的螺旋的磁矩之间可以通过 Heisenberg 交换相互作用发生耦合。他们基于这个模型研究了界面处二维电子气的自旋输运性质，Rashba 自旋轨道耦合没有被考虑（实际上，其大小可以通过门电压调控）。他们声称，当在界面里沿着  $\text{TbMnO}_3$  中磁矩的螺旋平面注入自旋（沿着图 2-16 中的  $\hat{\mathbf{b}}$  方向）并使自旋的极化方向与该平面垂直（沿着图 2-16 中的  $-\hat{\mathbf{a}}$  方向）时，自旋在扩散的过程中没有弛豫，因而自旋注入长度是无穷长的 [426]。基于此，他们还提出了“自旋闪存”的模型 [427]。但是，事实上并非如此。我们的研究表明，正是由于  $\text{TbMnO}_3$  中的螺旋磁矩与扩散过程中的自旋的 Heisenberg 交换相互作用，使得自旋的扩散长度是有限的，不论注入的自旋的极化方向如何。在第 10 章中，我们会具体研究这个问题。



### 第三章 石墨烯中的自旋动力学研究

虽然石墨烯在 2004 年才首次从实验上得到 [358]，但是它在合成方法 [359]、拉曼谱性质 [360, 449]、输运性质 [361] 以及光电性质 [362] 等方面已经被非常广泛地研究。此外，石墨烯里的自旋弛豫和输运也吸引了人们的极大兴趣。理想的本征石墨烯具有反演对称中心，因而对于远离 Dirac 点的电子而言，只有 EY 自旋弛豫机制，而不存在 DP 自旋弛豫机制。但是，由于结构上的涨落或者弯曲 [319, 376]、门电压提供的垂直石墨烯平面的电场 [164, 316, 376–378]、表面附着原子 [291, 315–317, 383, 450] 和衬底 [247, 317, 318, 451–453] 等因素的影响，Rashba 自旋轨道耦合 [66, 164, 319, 377] 会出现，从而在 DP 机制下导致自旋的弛豫。另外，结构上的涨落（尤其是附着原子和不平整的衬底引入的）的随机性导致的自旋轨道耦合也是随机的。在这种随机涨落的自旋轨道耦合场下，自旋翻转散射也会贡献自旋弛豫 [252]。

关于石墨烯中的自旋弛豫的研究已经有了很多（尤其是在实验上），而且还处在进一步的发展中。这些研究主要关注和力图解决以下两个问题：(I) 什么原因造成了弛豫时间上实验测量和理论预测的显著差异？石墨烯由于弱的自旋轨道耦合和超精细相互作用，其自旋弛豫时间被期待非常长，至少在  $\mu\text{s}$  的量级 [246, 247]。但是，早期的  $\text{SiO}_2$  衬底上的石墨烯里的自旋输运实验（绝大部分是非局域的四端 Hanle 输运测量，见章节 1.3.2）给出的自旋弛豫时间都在 100 ps 的量级 [238, 285, 287, 454]。后来的实验给出了 ns 量级的自旋弛豫时间 [455, 456]，仍远远小于人们的期望值。因此，什么样的外在因素限制了石墨烯中的自旋寿命，是一个需要了解的问题。(II) 石墨烯中占主导地位的自旋弛豫机制是什么？早期的很多实验工作者为了解释他们所得到的实验数据，认为 EY 机制主导石墨烯中的自旋弛豫 [238, 285, 287, 457]。但是理论研究却表明，这些得到 EY 机制主导的结论基于错误的判断，同时还表明在石墨烯中 EY 机制可以忽略，它远远不及 DP 机制重要 [289, 290]。然而，近期的几个实验却给出了排除 DP 机制的迹象 [455, 456]。这些实验表现出的显著特征是自旋弛豫对自旋守恒的动量散射的不敏感性，而这个特征在随机涨落的自旋轨道耦合场导致的自旋翻转散射这一类 EY 机制占主导时是可以理解的 [291]。因此，到底是哪种机制主导石墨烯中的自旋弛豫是需要解答的问题。

除了单层石墨烯（在本论文中，若无特别说明，“石墨烯”即指石墨单层），双层石墨烯 [458, 459] 甚至更多层石墨烯的自旋性质也引起了人们的关注。在这一章，我们对石墨烯和多层石墨烯中关于自旋动力学的已有研究做简要介绍。

## 3.1 石墨烯

### 3.1.1 实验研究

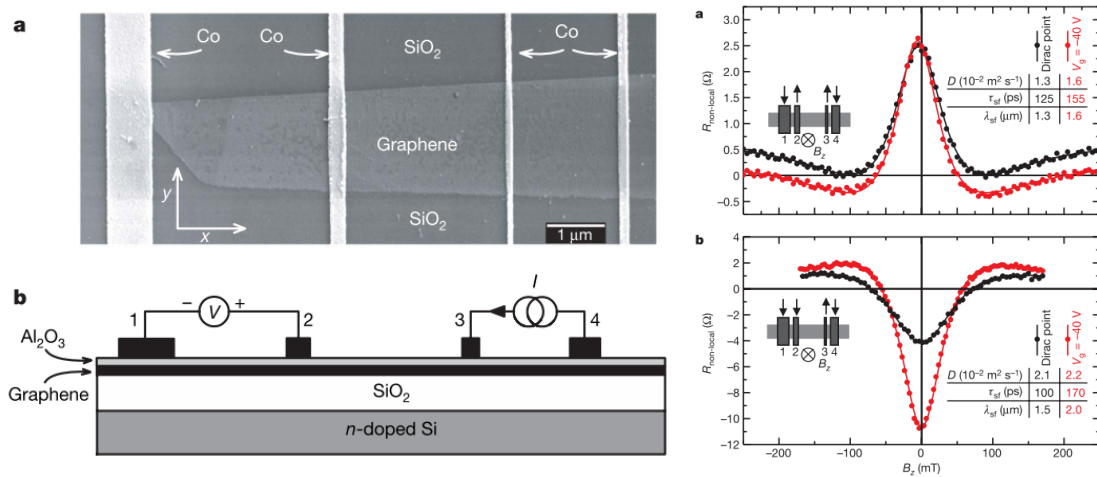


图 3-1: 左图: 石墨烯中的四端非局域自旋阀测量装置。有四个铁磁电极, 分别标记为 1-4。其中电极 3 用来注入自旋极化的电子, 电极 2 用来探测自旋极化信号。右图: 加了沿垂直石墨烯平面的磁场后的 Hanle 效应测量给出的自旋进动信号。摘自文献 [363]。

2007 年, Groningen 的小组首次报道了在石墨烯中用铁磁电极实现的非局域自旋注入和 Hanle 效应测量中的自旋进动 [363]。他们的实验装置如图 3-1 左图所示, 是典型的四端非局域自旋阀结构。通过对 Hanle 线形的拟合可以同时得到扩散系数  $D$  以及自旋弛豫时间  $\tau_s$  (图 3-1 右图)。他们发现, 石墨烯里的自旋弛豫时间在 100 ps 的量级, 自旋扩散长度在  $1 \mu\text{m}$  的量级。此外, 他们还发现, 这些测量对温度不敏感。在 Groningen 组的这个实验之后, 围绕着向石墨烯实现有效的自旋注入和理解石墨烯中的自旋弛豫等目标, 人们在石墨烯中做了一系列的实验。在这里我们对这些实验研究做简要的介绍。

#### 3.1.1.1 石墨烯的自旋注入

在上面提到的 Groningen 小组的实验中 [363], 为了克服铁磁电极和石墨烯间电导的不匹配对自旋注入效率的不利影响, 实验人员在铁磁性的 Co 电极和石墨烯中间加入  $\text{Al}_2\text{O}_3$  层做为隧穿势垒, 获得了 10% 左右的自旋注入效率 (电流通过电极后能够获得的自旋极化度) [363]。Riverside 小组验证, 如果不加隧穿势垒, 即让 Co 电极和石墨烯直接接触 (“透明”接触), 虽然也能够实现向石墨烯的自旋注入, 但是自旋注入效率只有 1% [239]。Riverside 小组还发现, 利用 MgO 做隧穿势垒, 可以实现高达 30% 的自旋注入效率 [460]。Groningen 小组通过进一步的实验发现, 在注入端电极

上加偏压使电子更快的漂移离开电极，可以提高自旋注入效率到 31 % [461]。另一方面，Zhang 等人指出，隧穿势垒虽然可以提到自旋注入效率，但是它的高接触电阻可能会对器件的高频应用带来问题 [462]。为了石墨烯在高频器件中的潜在应用，他们希望找到一种既有可观的自旋注入效率、又有适中电阻的电极。他们取 Cu 作为候选者，将其插入铁磁电极和石墨烯中间后，发现可以得到 2.46 % 的自旋注入效率 [462]。

除了利用铁磁电极向石墨烯进行非局域的自旋注入，利用外磁场下铁磁电极中进动的磁矩的阻尼衰减向石墨烯进行动力学的自旋泵浦注入（参考章节 1.2.3） [40, 211, 213, 214] 在最近也被研究 [215, 216]。2012 年，Patra 等人在铁磁电极 Py 和利用化学气相沉积（chemical vapor deposition, CVD）方法得到的石墨烯的接触结构 Py/graphene 中，在室温下利用铁磁共振测量发现在界面处有极大加强了 Gilbert 阻尼（Gilbert damping）（和 Py/platinum 结构下的测量对比） [215]。他们认为这个现象表明向石墨烯实现了动力学的自旋泵浦注入，并且推测利用化学气相沉积方法得到的石墨烯中有比较强的自旋轨道耦合 [215]。但是，Patra 等人的实验并没有给出石墨烯获得了自旋流的直接证据。2013 年，Tang 等人在这种动力学自旋注入的方案中，利用 Pd 电极进行逆自旋霍尔效应测量（示意图见图 3-2），给出了石墨烯中被注入了自旋流的直接证据 [216]。

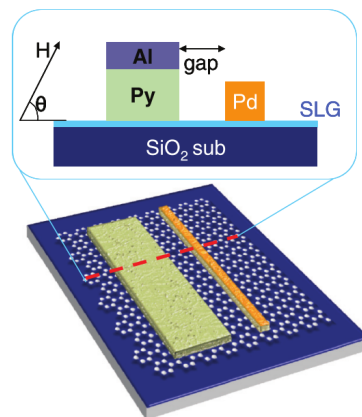
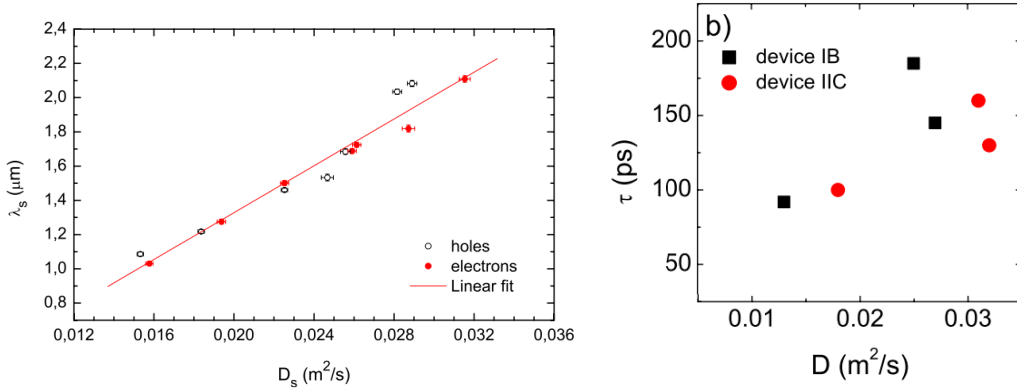


图 3-2: 石墨烯中动力学的自旋泵浦注入和自旋流测量的示意图。外磁场下的 Py 电极用于自旋泵浦注入，而 Pd 电极用于基于逆自旋霍尔效应对自旋流的测量。摘自文献 [216]。

### 3.1.1.2 调节电子浓度时自旋弛豫对动量散射的依赖

为了理解石墨烯中的自旋弛豫，不同的组在石墨烯的四端非局域自旋阀结构进行了 Hanle 效应测量，并希望从自旋弛豫和动量散射的依赖关系得到石墨烯中主要的自旋弛豫机制。Groningen 小组 [238, 285] 在室温下（见图 3-3），以及 Riverside 小组在低温下 ( $\leq 100$  K) [287]（见图 3-4 左边两个图），通过调节电子浓度的大小都观察到了自旋弛豫率和动量散射率之间的线性关系。由这个实验现象他们认为 EY 机制主导石墨



**图 3-3:** 左图: 室温下 Groningen 的小组在同一个石墨烯样品中通过门电压调节电子浓度 ( $0.5\text{--}3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) 观察到的自旋扩散长度和扩散系数的依赖关系。这个线性关系给出自旋弛豫时间和扩散系数的线性关系。摘自文献 [285]。右图: 室温下 Groningen 小组在不同的石墨烯样品中通过调节电子浓度得到的自旋弛豫时间和扩散系数的依赖关系。摘自文献 [238]。

烯中的自旋弛豫。需要指出的是, 理论研究 (见章节 3.1.2) 表明, 石墨烯中 EY 机制下的自旋弛豫时间  $\tau_s^{\text{EY}} \approx (\hbar v_f k_f / \lambda)^2 \tau_p$  (这里  $\lambda$  是 Rashba 自旋轨道耦合系数)。如果石墨烯中 EY 机制主导, 那么自旋弛豫时间和动量弛豫时间的比将正比于电子浓度。因此, 实验上在调节电子浓度时观察到的自旋弛豫时间和动量弛豫时间的线性关系实际上无法用 EY 机制来解释 [289, 290]。Jo 等人报告在 4.2 K 的低温下, 通过调节电子浓度, 他们观察到了  $\tau_s$  和  $\tau_p$  的非单调依赖 ( $\tau_s$  随着浓度单调变化, 但是  $\tau_p$  随浓度非单调变化) (见图 3-4 最右边的图)。不过, 他们发现  $\tau_s / \tau_p \propto k_f^2$  的关系是满足的, 并依此认为 EY 机制主导 [288]。但是这个结论也没有强的说服力。因为根据理论的研究 (见章节 3.1.2),  $\tau_s^{\text{EY}} / \tau_s^{\text{DP}} \approx (k_f l)^2$ ,  $l$  是电子的平均自由程。在实验所采用的石墨烯样品中,  $(k_f l)^2 \gg 1$ , 表明 DP 机制其实要比 EY 机制重要 [289]。

### 3.1.1.3 自旋弛豫对自旋极化方向各向异性依赖

除了施加横向外磁场进行 Hanle 效应测量, 有个别实验采用如图 3-5(a) 所示的具有一系列探测电极的结构做自旋信号对运输距离的依赖的测量 [237–239]。这种测量可以给出自旋扩散长度 (参考章节 1.3.2)。利用这个扩散长度, 基于漂移扩散模型 (参考章节 1.5.1), 可以反推出自旋弛豫的信息。Groningen 小组在这种测量中, 通过外加磁场调节铁磁电极的磁矩方向来改变注入自旋的极化方向 [如图 3-5 (b)-(c) 所示], 并进一步测量自旋运输和弛豫对注入的自旋的极化方向的依赖 [237]。他们发现, 在垂直石墨烯平面的外磁场由 0 (注入的自旋在平面内极化) 变为 2 T (注入的自旋垂直于石墨烯平面极化) 时, 测得的自旋弛豫时间减小了约 20%。注意到仅仅由这个自旋弛豫的各向异性并不能确定石墨烯中主要的自旋弛豫机制。这是由于 DP 和 EY 机制都能给出平面内和平面外弛豫的各向异性, 而且两种机制下的各向异性是一致的—在没有外磁场

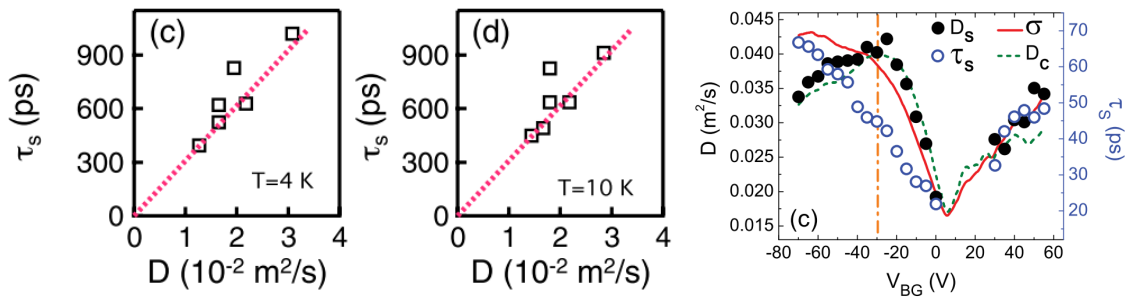


图 3-4: 左边两个图: Riverside 组在低温下通过调节电子浓度得到的自旋弛豫时间和扩散系数的线性关系。摘自文献 [287]。最右边一个图: 4.2 K 的低温下, 通过用门电压调节电子浓度, Jo 等人观察到的自旋弛豫时间 (空心圆圈, 刻度在右边) 对扩散系数 (短划线, 刻度在左边) 的非单调依赖 (主要体现在图示竖立链线的左边区域)。摘自文献 [288]。

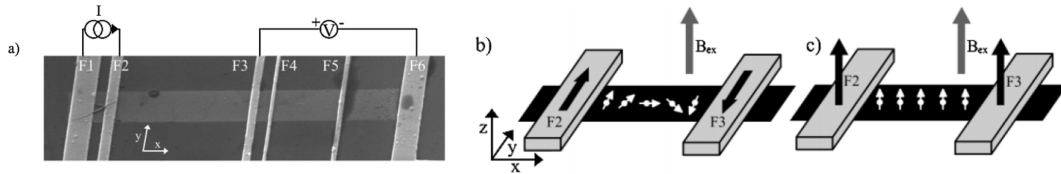


图 3-5: (a) 具有 6 个 Co 电极的石墨烯的扫描电子显微镜图像。F2 电极注入自旋极化的电子, F3-F5 电极用来探测不同位置的自旋极化信号。(b)-(c) 通过外加磁场改变铁磁电极的磁矩方向从而改变注入的自旋的极化方向。在垂直石墨烯平面的磁场达到 2 T 左右时, 铁磁电极的极化方向由 (b) 中的平面内方向变为 (c) 中的垂直平面方向。摘自文献 [237]。

的情况下, 平面外比平面内的弛豫要快一倍 [291]。不过, Groningen 小组在具有不同电子浓度的样品中的测量发现, 散射越弱, 自旋扩散长度越长。基于此, 他们认为 EY 机制在石墨烯的自旋弛豫中占主导 (同样, 如前所述, 这个论断也是有问题的)。

#### 3.1.1.4 固定电子浓度下动量散射对自旋弛豫的影响

正如前面所介绍的, 早期的实验人员为了得到自旋弛豫和动量散射的关系, 采用了改变电子浓度来调节动量散射的手段 [238, 285, 287, 457]。这种方法有很大的缺点。它除了造成电子浓度的改变, 还有可能同时造成其它参量 (比如衬底的杂质浓度) 的变化, 从而使问题复杂化。至少, EY 机制下的自旋弛豫时间和动量弛豫时间的比就正比于实验中的变化参量—电子浓度, 而不是常数。正是对这一点的忽视导致了早期实验中的错误判断 [238, 285, 287, 457]。

2012 年, Riverside 组对实验方案做了改进。他们在以  $\text{SiO}_2$  为衬底的石墨烯上利用有机配合基束缚纳米颗粒  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  作为电荷库来提供库仑势杂质散射 [455] (图 3-6 左图)。通过门电压操控和降温冷却手段, 他们可以调节纳米颗粒的带电量从而改变动量散射, 同时又保持石墨烯中的电子浓度不变。在 10 K 的温度下, 他们得到了 ns 量级的

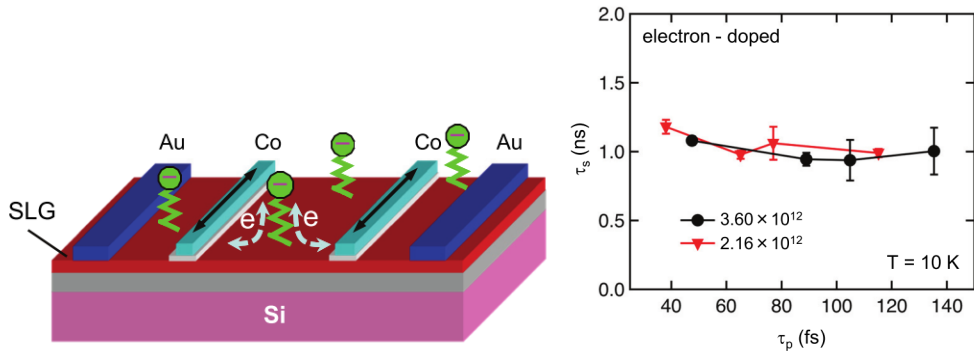


图 3-6: 左图: Riverside 组在以 SiO<sub>2</sub> 为衬底的石墨烯上利用有机配合基束缚纳米颗粒 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 作为一个电荷库来提供库仑势散射的示意图。右图: Riverside 组以有机配合基束缚的纳米颗粒 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 作为电荷库来调节动量散射的实验中观察到的自旋弛豫时间对动量散射的不敏感性。摘自文献 [455]。

自旋弛豫时间，但是这个自旋弛豫时间对动量散射几乎没有依赖（图 3-6 右图）。这种自旋弛豫对自旋守恒的动量散射的不敏感性给出了排除 DP 机制的信号。此外，根据我们的研究 [291]（见第 7 章），随机 Rashba 场的涨落导致的自旋翻转散射这一类 EY 机制对除了附着原子之外的其它因素产生的自旋守恒的动量散射确实不敏感。因此，这个实验在倾向于排除 DP 机制的同时，还给出了对类 EY 机制的支持。

3.1.1.5 附着原子和缺陷对自旋弛豫的影响

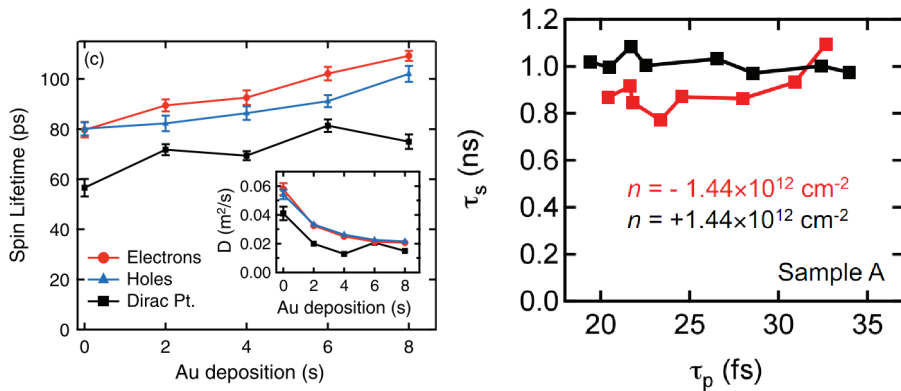


图 3-7: 左图: 18 K 下, Riverside 组在固定的电子浓度 ( $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) 下, 通过表面化学掺金实验观察到的自旋弛豫时间和扩散系数 (插图) 的反比关系。摘自文献 [286]。右图: Riverside 组在石墨烯表面掺 Mg 原子的实验中观察到的自旋弛豫时间对动量散射的不敏感性。摘自文献 [456]。

不同的组还在保持石墨烯中电子浓度不变的情况下，通过表面化学掺杂引入附着原子研究了其对自旋弛豫的影响。2010 年，Riverside 小组的 Pi 等人在 18 K 下通过 Au 原

子的表面化学掺杂，得到了 10-100 ps 量级的自旋弛豫时间。他们同时还发现，随着动量散射的增强，自旋弛豫时间变长 [286]（图 3-7 左图）。对于这个实验，DP 自旋弛豫机制被认为是重要的 [286, 291, 450]。2013 年，Riverside 组又在 12 K 的温度下利用 Mg 原子对 SiO<sub>2</sub> 衬底上的石墨烯进行了表面化学掺杂，得到了 ns 量级的自旋弛豫时间。但是，他们却观察到自旋弛豫时间对动量散射没有依赖（图 3-7 右图） [456]。和前面介绍的 Riverside 组通过有机配合基束缚纳米颗粒 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 作为电荷库来提供库仑势杂质散射（见前面的章节 3.1.1.4） [455] 的实验一样，这个实验也给出了排除 DP 机制的信号，同时对随机 Rashba 场的涨落导致的类 EY 机制给予了支持。如果是这种类 EY 机制主导石墨烯中的自旋弛豫，那么在 Riverside 组的这个表面掺 Mg 的实验中 [456]，随机 Rashba 场可能是由 Mg 原子之外的其它质量上也许更重的附着原子导致的，并因此对 Mg 的掺杂不敏感。这些未知的“其它附着原子”很有可能是在实验上放置铁磁电极的时候引入的。

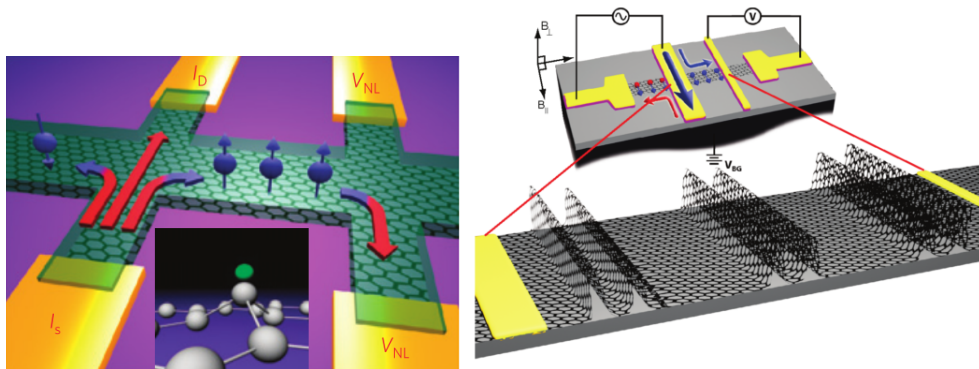


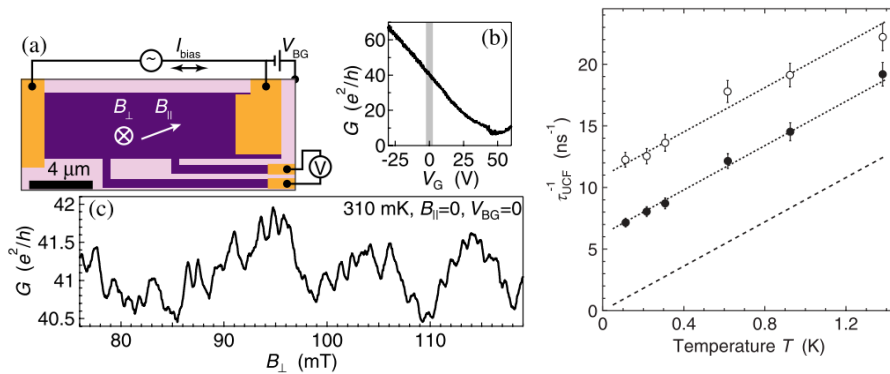
图 3-8: 左图: 来自 Singapore 的组在 SiO<sub>2</sub> 衬底上弱氢化（氢原子的覆盖率为 0.02-0.05%）的石墨烯样品中利用自旋霍尔效应和非局域的逆自旋霍尔效应测量自旋弛豫的装置和原理示意图。左侧的一对电极注入电流。在强的自旋霍尔效应下，会有自旋极化流流向中间横向的“桥”状结构。在该“桥”状区域，施加平面内的磁场可以调控自旋的极化方向。如果自旋流到达右侧两个电极间的石墨区域时极化方向沿着石墨平面（因而平行于自旋流的方向），则不会在右侧的一对电极间产生逆自旋霍尔效应；如果自旋极化流有垂直于石墨烯平面的极化分量，则会产生逆自旋霍尔效应，从而在右侧的一对电极上产生电压差。插图：氢附着原子（绿色）导致的石墨烯表面的结构形变示意图。摘自文献 [383]。右图：通过在 Cu 上用化学气相沉积、然后转移到 SiO<sub>2</sub> 衬底上的方法得到的波纹状石墨烯以及四端非局域自旋阀结构示意图。摘自文献 [463]。

除了在石墨烯的表面进行金属原子的掺杂，表面氢原子掺杂对自旋弛豫的影响也被研究。2012 年，Riverside 组在 15 K 的低温下，通过非局域的自旋输运测量得到了 SiO<sub>2</sub> 衬底上的石墨烯在表面附着了氢原子（覆盖率 0.1 % 左右）后会形成局域磁矩的证据 [464]。这些局域的磁矩通过自旋翻转散射贡献石墨烯中巡游电子的自旋弛豫 [464]。随后，2013 年，Groningen 组在室温下也研究了 SiO<sub>2</sub> 衬底上部分氢化（覆盖率 0.02 % 左右）的石墨烯的自旋弛豫 [465]。但是，他们并没有找到局域磁矩存在的证据，反而还发现和没有掺氢的情况相比，自旋弛豫时间最大可以变长 3 倍，从而达

到 ns 的量级 [465]。最近，来自 Singapore 的组报告，在室温下，他们在 SiO<sub>2</sub> 衬底上弱氢化（覆盖率为 0.02-0.05%）的石墨烯样品中，利用自旋霍尔效应和非局域的逆自旋霍尔效应测量发现自旋弛豫时间只有 90 ps（实验装置示意图见图 3-8 左图） [383]。该实验组认为氢附着原子极大地加强了自旋轨道耦合，从而能在石墨烯中导致自旋霍尔效应。此外，他们认为 EY 机制主导自旋弛豫，并且从 EY 机制下自旋弛豫时间的解析公式反推出自旋轨道耦合强度  $\lambda$  在 2.5 meV 左右 [383]。

最近，Lundeberg 等人在 1 K 以下的极低温下，基于对 SiO<sub>2</sub> 衬底上石墨烯中量子干涉效应的测量，认为石墨烯中存在磁性缺陷，而且这些磁性缺陷导致了石墨烯中电子的 4.7 ns 左右的自旋翻转散射时间 [466]。这个时间尺度和实验得到的自旋弛豫时间已经很接近。因此，Lundeberg 等人认为磁性缺陷可能是导致石墨烯中电子自旋弛豫的主要原因。在实验中，他们对石墨烯进行四端测量 [图 3-9 左图 (a)]，给出了石墨烯在垂直的弱磁场下的普适电导涨落（universal conductance fluctuation, UCF）

[图 3-9 左图 (c)]。从这个磁场依赖的涨落可以得到普适电导的去相位速率  $\tau_{\text{UCF}}^{-1}$ ，而这个去相位速率由所有的散射（电子-电子散射和电子-缺陷散射）贡献。图 3-9 右图给出了  $\tau_{\text{UCF}}^{-1}$  对温度的依赖。其中空心圆点是平面内没有外加磁场的结果，实心圆点是平面内加了大到 6 T 磁场的结果。这两条线都给出了零温极限下的有限饱和值，而两条线却具有相同的斜率，并且具有对温度不敏感的差值。Lundeberg 等人认为，两条曲线的斜率对应于电子-电子库仑散射对温度的依赖 [467, 468]，零温极限下  $\tau_{\text{UCF}}^{-1}$  的非零饱和值给出了缺陷（磁性或者非磁性的）存在的证据。在平面内的强磁场下，磁性缺陷被完全极化，不再贡献自旋翻转散射，因此两条曲线之间的差给出了磁性缺陷导致的自旋翻转散射时间，在 4.7 ns 左右。



**图 3-9:** 左图: (a) 实验设置示意图。深紫色区是石墨烯，金色代表电极，浅色表示被刻蚀掉的区域。(b) 电导对门电压的依赖。阴影区表示实验测量所选择的区域。(c) 垂直磁场下典型的普适电导涨落。右图:  $\tau_{\text{UCF}}^{-1}$  对温度的依赖。空心圆圈对应平面内无外加磁场的情形；实心圆圈对应平面内有大到 6 T 的磁场的情形。短划线是零温极限下  $\tau_{\text{UCF}}^{-1}$  普适电导涨落区域零的参考线。摘自文献 [466]。



### 3.1.1.6 波纹状的结构起伏对自旋弛豫的影响

Avsar 等人通过先在 Cu 上用化学气相沉积然后转移到  $\text{SiO}_2$  衬底上的方法得到了波纹状起伏的石墨烯 [463]。在该样品中，在 100 nm 左右的宽度内，石墨平面的高度涨落 0.2-2 nm（示意图见图 3-8 右图）。电子的迁移率在  $1-2 \times 10^3 \text{ cm}^2/(\text{V s})$  附近。通过四端非局域自旋阀结构下的 Hanle 效应测量，Avsar 等人在 5-300 K 的温度范围内得到了对温度非常不敏感的 100 ps 量级的自旋弛豫时间 [463]。他们认为，和通过力学剥落的方法得到的石墨烯比起来，这里的石墨烯在结构上的显著弯曲有助于增强 Rashba 自旋轨道耦合 [376]。实际上，根据 Jeong 等人的研究，石墨烯中这种波纹状的起伏不仅贡献 Rashba 型的自旋轨道耦合，还导致额外的类 Zeeman 项 [319]。这个类 Zeeman 项在  $\mathbf{K}$  和  $\mathbf{K}'$  能谷中具有相反的符号，它连同谷间散射会提供一个自旋弛豫的通道 [284]。在章节 7.2 我们会具体研究这个问题。

### 3.1.1.7 电极对自旋弛豫的影响

章节 3.1.1.1 表明，可以用不同的电极实现向石墨烯中的自旋注入。但是铁磁电极和石墨烯的直接接触可能会引入额外的弛豫过程，从而对实验测量造成影响，使得测得的自旋弛豫时间偏小 [454]。一种可能的因素是铁磁电极会在局部造成空间上非均匀的漏场。这个非均匀的漏场会导致注入的自旋的进动的非均匀扩展，从而在铁磁电极下产生自旋的弛豫。这个效应在铁磁电极/半导体的直接接触中很重要 [469]（见示意图 3-10 左图），在铁磁电极/石墨烯的直接接触中也极有可能存在。另一个可能的因素是铁磁电极和石墨烯的直接接触可能会导致界面处自旋翻转散射的存在。还有一种可能因素是，注入的自旋会扩散回到铁磁电极，造成对 Hanle 输运测量的影响 [238]。通过在铁磁电极和石墨烯中插入自旋选择的绝缘层如  $\text{Al}_2\text{O}_3$  或者  $\text{MgO}$  实现隧穿注入，有助于减少上面这些铁磁电极和石墨烯直接接触导致的自旋弛豫的可能性。

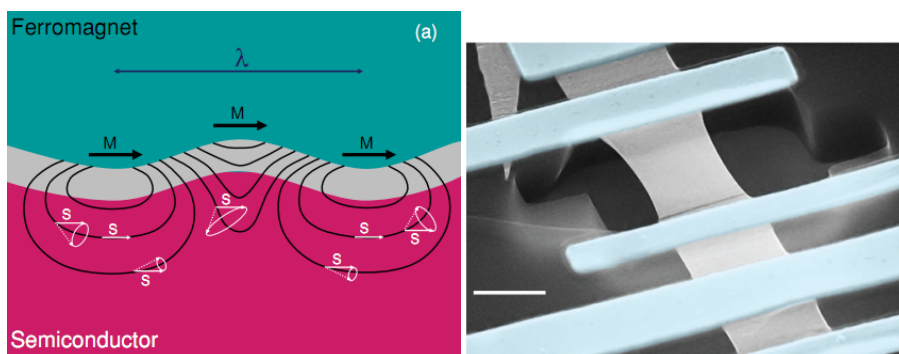


图 3-10: 左图: 利用铁磁电极向半导体注入自旋时, 铁磁电极非均匀的漏场造成自旋进动的非均匀扩展的示意图。摘自文献 [469]。右图: Groningen 小组在悬空的石墨烯上的非局域自旋阀结构的扫描电镜图像。摘自文献 [470]。

## 3.1.1.8 衬底对自旋弛豫和自旋轨道耦合的影响

上面介绍的所有实验都是在  $\text{SiO}_2$  衬底上石墨烯中的测量。除此之外，其它衬底上的石墨烯里的自旋弛豫也有一些研究。Dlubak 等人对 SiC 衬底上石墨烯的磁阻效应的测量表明，自旋扩散长度可以达到  $100 \mu\text{m}$  的量级 [471]。由这个扩散长度和样品中的动量散射时间，Dlubak 估算出自旋弛豫时间在  $100 \text{ ns}$  的量级。对于这一现象，Dlubak 等人猜测可能是由于两个原因造成的。一个原因是 SiC 衬底上的石墨烯里电子的迁移率要高 [ $\sim 1-2 \times 10^4 \text{ cm}^2/(\text{V s})$ ]，因此可能的 EY 型自旋翻转散射弱；另一个原因是 SiC 衬底上的石墨烯要更平整一些，使得结构弯曲导致的 Rashba 自旋轨道耦合增强这一效应变弱 [471]。但是，Groningen 的小组在 SiC 衬底上具有  $2 \times 10^3 \text{ cm}^2/(\text{V s})$  左右迁移率的石墨烯样品中，采用非局域自旋阀结构下的 Hanle 效应测量，得到自旋扩散长度  $\lesssim 1 \mu\text{m}$ ，自旋弛豫时间在 ns 量级 [472]。此外，Groningen 的小组在平整的 BN 衬底上的石墨烯中得到了更高的电子迁移率 [ $\sim 4 \times 10^4 \text{ cm}^2/(\text{V s})$ ]，然而自旋扩散长度却还是和  $\text{SiO}_2$  衬底上的石墨烯里类似，在  $\mu\text{m}$  量级，对应的自旋弛豫时间在  $100 \text{ ps}$  的量级 [473]。从这个实验现象，Groningen 小组得出衬底对自旋输运和弛豫的影响很微弱这一结论 [473]。更进一步，Groningen 小组还在悬空的石墨烯中进行了自旋输运的测量（实验装置的扫描电镜图见图 3-10 右图）。这时，电子的迁移率进一步提高 [ $\sim 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V s})$ ]。但是，自旋扩散长度仍旧在  $\mu\text{m}$  量级，自旋弛豫时间在  $100 \text{ ps}$  的量级 [470]。通过在全空间非均匀体系用有磁场的漂移扩散模型进行模拟，Groningen 小组认为电极下的石墨烯和衬底不可避免的接触对自旋的输运有很大影响 [470]。

此外，对于不同衬底上的石墨烯里的自旋轨道耦合也有一些实验研究。石墨烯中碳原子的轨道和衬底原子轨道的杂化有望影响石墨烯  $\pi$  带电子的自旋轨道耦合。研究发现，对于生长在原子质量比较轻的 Ni 或 Co 衬底上的石墨烯，自旋轨道耦合导致的自旋劈裂很小，不足以用自旋分辨的光电子谱实验来测量 [474]。如果希望在石墨烯中得到比较大的、光学实验可分辨的自旋轨道耦合（ $10 \text{ meV}$  的量级），采用重原子的衬底是一种可能的选择。Varykhalov 等人在 graphene/Au/Ni 的结构中发现，石墨烯在 Dirac 点附近仍旧具有好的线性色散关系，但是 Rashba 自旋轨道耦合可以提高到  $10-100 \text{ meV}$  的大小 [317, 452]。最近，他们还发现，在和 Au 具有接近的原子质量的 Ir 的 (111) 衬底上，石墨烯在 Dirac 点附近也保持好的线性色散关系，同时 Rashba 自旋轨道耦合可以提高到  $50 \text{ meV}$  左右 [453]。

## 3.1.2 理论研究

为了理解石墨烯里的自旋弛豫，理论研究是必要的 [246, 246, 247, 269, 289, 290, 315, 378, 382]。Fabian 的组从紧束缚模型给出了石墨烯中包括自旋轨道耦合的有效哈密顿量 [382]，并从第一性原理的计算给出了内禀自旋轨道耦合和门电压下的 Rashba 自旋轨道耦合系数的大小 [378]。在考虑了  $d$  轨道以及更高的轨道后，紧束缚模型给出内禀

自旋轨道耦合强度在  $12 \mu\text{eV}$  左右 [316, 378, 382]。垂直电场  $E_z$  贡献的 Rashba 自旋轨道耦合强度记为  $\lambda = \zeta E_z$ 。第一性原理计算给出  $\zeta \approx 5 \mu\text{eV}/(\text{V}/\text{nm})$  [316, 378]。在典型的  $E_z = 300 \text{ kV}/\text{cm}$  的电场下，Rashba 自旋轨道耦合的强度  $\lambda$  在  $0.1 \mu\text{eV}$  的量级。此外，石墨烯平面结构的弯曲也会贡献 Rashba 自旋轨道耦合 [319, 376]。具有  $50 \text{ nm}$  左右曲率半径的结构弯曲导致局域的 Rashba 自旋轨道耦合强度约为  $8.5 \mu\text{eV}$  [376]。

对于石墨烯中的 EY 和 DP 自旋弛豫机制，理论研究表明，EY 机制既不能解释在浓度变化时自旋弛豫率和动量散射率之间的线性关系，同时也没有 DP 机制重要 [289, 290]。根据文献 [289, 290]，EY 和 DP 机制导致的自旋弛豫时间分别为  $\tau_s^{\text{EY}} \approx (\hbar v_f k_f / \lambda)^2 \tau_p$  和  $\tau_s^{\text{DP}} \approx \hbar^2 / (\lambda^2 \tau_p)$ 。因此， $\tau_s^{\text{EY}} / \tau_p \propto k_f^2$  [289, 290]，和实验中体现的与浓度无关的  $\tau_s$  和  $\tau_p$  的线性关系不一致 [238, 285, 287]。此外，根据这些理论研究， $\tau_s^{\text{EY}} / \tau_s^{\text{DP}} \approx (k_f l)^2$ ， $l$  是电子的平均自由程。在实验采用的石墨烯样品中， $(k_f l)^2 \gg 1$  被普遍的满足，表明 DP 机制比 EY 机制重要 [289]。由于以上原因，EY 机制不太可能是石墨烯中主要的自旋弛豫机制。

DP 机制成了石墨烯中主导自旋弛豫的候选者之一。最初，理论上给出的 DP 机制导致的自旋弛豫时间远远大于实验上观察到的  $100\text{-}1000 \text{ ps}$  量级的数值 [246, 247, 475]。这是因为这些理论计算所基于的 Rashba 自旋轨道耦合都很弱。比如，前面提到，典型的门电压贡献的 Rashba 自旋轨道耦合强度在  $0.1 \mu\text{eV}$  的量级 [316, 378]。在这种强度的 Rashba 自旋轨道耦合下，Ertler 等人 [378] 以及 Zhou 和 Wu [246] 计算得到  $\text{SiO}_2$  衬底上的石墨烯中的自旋弛豫时间在  $\mu\text{s}$  或以上的量级。再比如，在有结构弯曲的石墨烯中，Hernando 等人计算了  $\mu\text{eV}$  量级的局域 Rashba 自旋轨道耦合下的自旋弛豫，得到的弛豫时间在  $0.1 \mu\text{s}$  的量级 [475]。此外，除了 DP 机制，Hernando 等人还考虑了晶格形变和石墨烯样品边界可能产生的局域磁矩对石墨烯中自旋弛豫的贡献。他们发现在他们的模型下这个因素也只导致  $0.1 \mu\text{s}$  量级的自旋弛豫时间 [475]。

虽然门电压和结构上的弯曲贡献的 Rashba 自旋轨道耦合只有  $0.1\text{-}1 \mu\text{eV}$  的量级，但是研究发现，其它的外在因素比如附着原子（氢原子和金原子等）以及重原子衬底，可以通过使石墨烯结构形变而引入碳原子轨道的  $sp^3$  杂化以及和衬底原子轨道的杂化来极大增强 Rashba 自旋轨道耦合，使其达到  $\text{meV}$  甚至以上的量级 [315–318, 383, 452, 453]。最近，基于第一性原理的计算甚至表明，石墨烯表面覆盖率为  $1/8$  的 Au 原子（每一个  $2 \times 2$  的超原胞里有一个金原子）可以造成高达  $200 \text{ meV}$  的 Rashba 型自旋劈裂 [476]。在  $0.1\text{-}1 \text{ meV}$  量级的 Rashba 自旋轨道耦合下，DP 机制给出的自旋弛豫时间 [247, 291, 450] 和实验观测值可比。但是，DP 机制是否可以解释实验上在  $\text{SiO}_2$  衬底上的石墨烯中调节电子浓度时观察到的自旋弛豫率和动量散射率间的线性关系 [238, 285, 287]，则是一个问题。另外， $\text{SiO}_2$  衬底上石墨烯上的附着原子和结构上的涨落对 Rashba 自旋轨道耦合的增强效应是随机的。自旋轨道耦合的随机涨落会导致自旋翻转散射 [252, 267, 268]（参考章节 1.4.4），从而贡献自旋弛豫。从自旋翻转的角度来说，这是一种 EY 的机制。实际上，在波纹状起伏的石墨烯中，平均 Rashba 场为零但是其涨落非零。这种情形下的自旋弛豫已经被 Dugaev 等人利用动力学方程研

究过 [269]。另外，衬底中电离杂质提供的涨落电场也可以贡献随机的 Rashba 自旋轨道耦合，它的平均值非零。这种随机 Rashba 场下的自旋弛豫也已经被 Ertler 等人利用 Monte Carlo 模拟研究过 [247]。但是，这两种情形下计算给出的自旋弛豫时间都比实验观测值要长很多。然而，衬底涨落和附着原子的随机分布导致的随机 Rashba 场下的自旋弛豫却极有可能给出不一样的结果，而且这种情况下 DP 机制和类 EY 机制哪种重要也不清楚。

基于以上原因，我们在以 SiO<sub>2</sub> 为衬底的石墨烯中建立了附着原子和衬底导致的随机 Rashba 场的模型，并且从这个模型出发研究了石墨烯中的自旋弛豫 [291]（第 7 章）。通过拟合和比较 Groningen 组、Riverside 组和 Jo 等人的实验 [285–288]，我们发现，如果不考虑 Riverside 组 Pi 等人表面掺金的实验 [286]，在考虑进随机 Rashba 场的关联长度对温度、电子浓度、附着原子浓度等因素的依赖后，DP 机制和随机 Rashba 场的涨落导致的自旋翻转散射机制都有可能是主导的自旋弛豫机制。如果要将这些不同组的实验（包括 Pi 等人的实验 [286]）统一解释，DP 机制是合理的选择。进而，在 DP 机制的框架下，我们研究了 Riverside 小组 Pi 等人的实验样品中的自旋输运 [450]（第 8 章）。我们发现，在 DP 机制下，自旋输运对注入的自旋的极化方向有明显的各向异性依赖，而且在输运的过程中自旋极化可以在实空间进动。我们所给出的各向异性性质以及自旋极化的实空间进动是忽略了自旋进动和相干性的漂移—扩散模型所不能给出的 [450]。此外，我们还在大尺度波纹状起伏的低迁移率的石墨烯中研究了 DP 机制下的自旋弛豫 [284]。在前面 3.1.1.6 章节中我们已经提到，Jeong 等人的研究表明，这种波纹状的结构不仅导致 Rashba 的自旋轨道耦合，还贡献一个在两个能谷中具有相反符号的类 Zeeman 项。这个类 Zeeman 项连同谷间电声散射，在室温附近能够非常有效的导致石墨烯平面内的自旋弛豫，使得自旋弛豫时间达到 100 ps 的量级（见章节 7.2）。

在我们的工作 [291, 450] 之后，Riverside 组通过有机配合基束缚纳米颗粒 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 作为电荷库来提供库仑势杂质散射（见前面的章节 3.1.1.4）[455] 以及表面掺 Mg 的实验（见前面的章节 3.1.1.5）[456] 观察到了自旋弛豫时间对动量散射的不敏感性。这个实验现象给出了排除 DP 机制的信号，而对随机 Rashba 场的涨落导致的自旋翻转散射这一类 EY 机制提供了支持。为了尝试弄清楚 DP 和类 EY 机制中哪种占主导，我们在第 8 章的末尾从解析上研究了只有类 EY 机制时石墨烯中的自旋输运。基于 DP 和类 EY 机制下石墨烯中自旋输运性质的不同之处，我们给出了实验上从输运测量判断哪种机制重要的可能方案。

此外，Dyrdał 和 Barnaś 还基于 Dugaev 等人给出的石墨烯的波纹状起伏导致的随机 Rashba 场的模型 [269] 以及我们给出的附着原子导致的随机 Rashba 场的模型 [291]，研究了平均值为零、但是涨落非零的随机 Rashba 场下的自旋霍尔效应 [477]。他们的研究表明，即使 Rashba 场的平均值为零，只要其涨落非零，仍旧存在自旋霍尔电导  $\sigma_{xy}^{sz} = \frac{e}{4\pi} \frac{\tau_D}{\tau_s}$ 。这个霍尔电导与涨落的 Rashba 场的具体的关联函数无关，与总的动量散射时间和自旋弛豫时间的比有关。

### 3.2 双层和多层石墨烯

双层石墨烯（晶格结构示意图见 3-11 左图）中的自旋弛豫已经有了一些的实验研究。在  $\text{SiO}_2$  衬底上的 [287, 463, 478] 和悬空的 [479] 双层石墨烯中，实验测量的自旋弛豫时间都在 10-1000 ps 的范围。Yang 等人的实验发现双层石墨烯中自旋弛豫时间对温度不敏感 [478]，而 Riverside 组却报告了自旋弛豫时间随着温度升高明显下降的现象 [287]。在低温下，这两个实验都发现自旋弛豫时间随着电子浓度的增加而下降。但是在室温下，Yang 等人发现自旋弛豫时间随着电子浓度的增加而变长，而 Riverside 组发现自旋弛豫时间对电子浓度不敏感。此外，Yang 等人在电子浓度相同而迁移率不同的样品中的对比实验发现，不管在室温还是低温下，自旋弛豫时间都和迁移率成反比（图 3-11 右图）。Avsar 通过化学气相沉积然后转移到  $\text{SiO}_2$  衬底上的方法得到了双层石墨烯。在这个样品中，他们测量得到的自旋弛豫时间对温度和电子浓度的依赖与前面 Yang 等人在用力学剥落的方法得到的双层石墨烯中的测量结果在定性和定量上都是一致的 [463]。

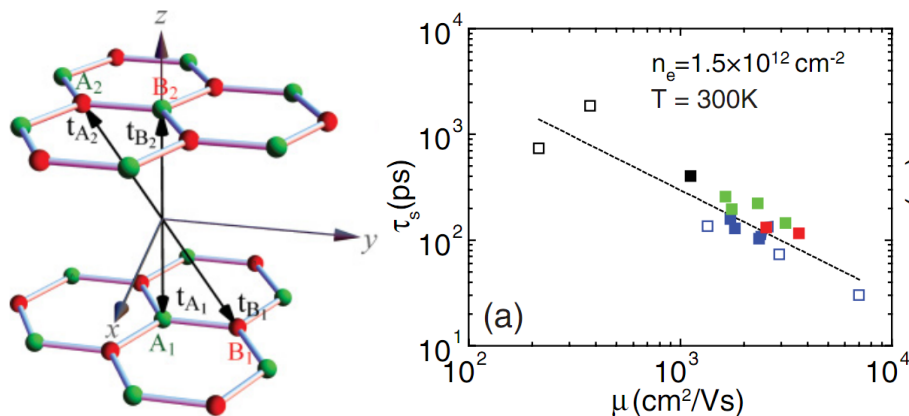


图 3-11: 左图: A-B 堆叠的双层石墨烯的晶格结构示意图。摘自文献 [480]。右图: 室温下, Yang 等人在固定电子浓度时, 在不同的迁移率的双层石墨烯样品中测得的自旋弛豫时间和迁移率的依赖关系。摘自文献 [478]。

目前关于双层石墨烯中电子的自旋弛豫有少量的理论研究。Guinea 基于对称性分析给出了没有外电场情况下双层石墨烯中的有效哈密顿量 [481]，Fabian 的组从紧束缚模型和第一性原理计算给出了有外电场时的完整的哈密顿量（包括 Rashba 自旋轨道耦合），并给出了相关系数的大小 [480]。Diez 和 Burkard 在 DP 机制下考虑进长程的电子-杂质散射，研究了双层石墨烯中最低导带电子的自旋弛豫 [482]。但是，在他们的计算中，只考虑了层间偏压连同本征的自旋轨道耦合导致的有效自旋轨道耦合，而没有考虑门电压额外导致的 Rashba 自旋轨道耦合。最近，Wang 和 Wu 考虑了完整的自旋轨道耦合，研究了双层石墨烯中最低导带电子的自旋弛豫 [483]。他们发现，在门电压

下，自旋轨道耦合在两个能谷中导致方向相反的垂直于双层石墨烯平面的有效磁场。这个方向相反的有效磁场提供谷间的非均匀扩展，在声子和短程杂质辅助的谷间散射的作用下提供平面内的自旋弛豫的通道 [284]。在没有短程杂质的情况下，这个自旋弛豫通道导致自旋弛豫时间对温度的依赖中一个谷的出现。谷对应的自旋弛豫时间在 100 ps 的量级，和实验值可比拟。此外，这个自旋弛豫通道还导致平面内和平面外自旋弛豫的各向异性。在他们的研究中，所有相关的散射都严格考虑了进来。

对于更多层的石墨烯里的自旋弛豫也有一些实验研究。Abel 等人在三层石墨烯中利用 Co 电极和石墨烯直接接触做了四端非局域自旋阀的自旋输运测量 [484]。他们发现，随着温度从 150 K 升高到 230 K，自旋扩散系数变大，而自旋弛豫时间变短。基于这个现象，他们认为 DP 机制主导自旋弛豫。此外，实验观察到的自旋弛豫时间只有 10 ps 的量级。他们认为铁磁电极和石墨烯的直接接触是造成这么短的自旋弛豫时间的一个可能因素。Groningen 小组还在多层石墨烯中利用 Hanle 效应研究了室温下自旋的弛豫和输运 [457]。通过调节电子浓度，他们发现，从单层到 20 层的石墨烯样品中，都观察到自旋扩散长度（自旋弛豫时间）对扩散系数的线性依赖（图 3-12 左图）。基于这个现象，他们认为在他们的单层和多层石墨烯样品中 EY 机制主导自旋弛豫。他们还研究了自旋扩散长度关于扩散系数的比例系数对层数的依赖。结果表明，层数越多，这个系数越大，意味着自旋弛豫时间越长（图 3-12 右图）。在他们的实验中，测量得到的自旋弛豫时间最大在 500-600 ps 的范围。此外，Goto 等人在 2.5 nm 厚度的多层石墨烯中，通过非局域的自旋阀测量，发现自旋扩散长度最大可以达到 8  $\mu\text{m}$  [485]。最近，在理论上，Kormányos 和 Burkard 从对称性分析和紧束缚模型的角度研究了 ABC 堆叠的三层石墨烯中本征的自旋轨道耦合 [486]。同时，他们还讨论了衬底或者附着原子使得三层石墨烯中的一层的自旋轨道耦合得到加强的情形 [486]。

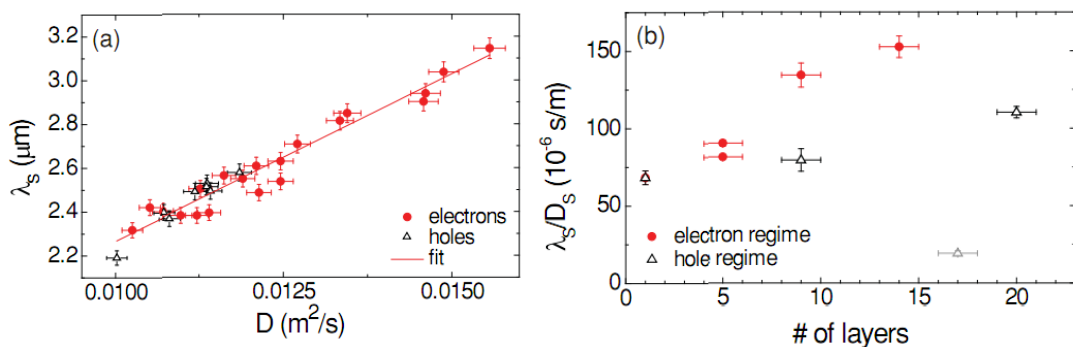


图 3-12: (a) Groningen 组在 14 层石墨烯中，利用四端非局域自旋阀的 Hanle 效应测量得到的自旋扩散长度对扩散系数的线性关系。(b) 自旋扩散长度和扩散系数的比例系数对石墨烯层数的依赖。摘自文献 [457]。

### 3.3 小结

关于石墨烯中的自旋动力学已经有了非常多的实验研究。但是，目前为止，这些丰富的实验现象还没有彻底的理解。同时，关于石墨烯中自旋动力学的理论研究却还不足够。第 7 和第 8 章将依次介绍我们在石墨烯中对于自旋弛豫和输运的工作。在章节 8.6，我们将从自旋输运的角度给出一个实验上确定单层石墨烯中 DP 和类 EY 机制中哪一个主导自旋弛豫的可能方案。

## 第四章 动力学自旋 Bloch 方程和自旋弛豫机制

在这一章，我们介绍动力学自旋 Bloch 方程，并基于该方程讨论时间域里自旋弛豫和空间域里自旋输运的性质。在本论文中，对二维电子体系的自旋动力学的研究都是基于动力学自旋 Bloch 方程方法。

动力学自旋 Bloch 方程是 Wu 将光学 Bloch 方程推广到自旋空间建立和发展起来的 [11]。它最初被用以研究半导体里载流子的自旋动力学 [11]，之后被扩展到石墨烯 [246, 284, 291, 450] 和拓扑绝缘体 [487] 等体系。动力学自旋 Bloch 方程方法具有如下特点：(I) 它能够把所有的散射包括库仑散射严格完整的包含进来 [264]；(II) 能够考虑进各种外场如静电场、静磁场甚至是含时外场 [488, 489] 的效应；(III) 能够处理远离平衡（如大的自旋极化、大的外加电场）的情况 [308, 490, 491]；(IV) 能够将主要的自旋弛豫机制，包括 DP、EY、BAP 和随机自旋轨道耦合导致的自旋翻转散射等机制同时考虑进来 [278, 291, 300, 325]；(V) 能够处理多体效应，除了前面提到的库仑散射，库仑作用导致的 Hartree-Fock 自能和多体的动态屏蔽效应都可以很好地被囊括进来 [307–309, 492]；(VI) 能够应用到空间均匀体系里自旋弛豫和非均匀体系里自旋输运的研究 [275, 276, 450, 493]。

由于在本论文中，我们关注二维电子体系，因此我们在二维体系下给出动力学自旋 Bloch 方程的形式。

### 4.1 动力学自旋 Bloch 方程

通过非平衡格林函数方法，在广义的 Kadanoff-Baym 假设下，可以得到动力学的自旋 Bloch 方程 [11]

$$\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \Big|_{\text{coh}} + \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \Big|_{\text{scat}} + \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \Big|_{\text{dif}} + \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \Big|_{\text{dri}}. \quad (4.1)$$

这里  $\rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  是二维平面内位置  $\mathbf{r}$ ，时刻  $t$  下单粒子的密度矩阵。对于单带体系，考虑自旋自由度， $\rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  是一个  $2 \times 2$  的矩阵。其对角部分表示载流子的分布，非对角部分表示两个自旋自由度间的关联。对于  $n$  带体系，原则上  $\rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  是  $2n \times 2n$  的矩阵。如果带间的关联可以忽略，则  $\rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  约化为  $n$  个  $2 \times 2$  的矩阵，自旋 Bloch 方程相应的变为  $n$  个  $2 \times 2$  的密度矩阵所满足的方程组。



方程 (4.1) 等号右边的第一项是自旋在自旋轨道耦合产生的有效磁场以及外磁场下的相干进动项,

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{coh}} = -i[E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t), \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)], \quad (4.2)$$

其中  $[A, B] = AB - BA$  是对易子。这里  $(E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t))_{n_1 n_2} = \langle n_1 | H_0 | n_2 \rangle + e\mathbf{E} \cdot \langle n_1 | \mathbf{r} | n_2 \rangle + \Sigma_{\text{HF}}^{n_1 n_2}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ 。  $H_e = H_0 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$  是单电子哈密顿量, 其中  $H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*} + H_{\text{so}}(\mathbf{P}) + \frac{1}{2}g\mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} + V(z)$ ,  $H_{\text{so}}(\mathbf{P})$  是自旋轨道耦合,  $\mathbf{B}$  是外加磁场,  $V(z)$  是约束势 (假设量子阱的约束沿着  $z$  方向),  $\mathbf{E}$  是外加电场。  $\{|n\rangle\}$  是一组正交归一的基。在强约束以及 Voigt 构型的磁场下 (或者其它构型下的小磁场), 磁场的轨道效应可以忽略, 因而机械动量  $\mathbf{P}$  用正则动量  $\mathbf{p}$  代替。这时  $H_0$  的本征态可以记为  $|\mathbf{k}\rangle|n\rangle_{\mathbf{k}}$ , 满足  $H_0|\mathbf{k}\rangle|n\rangle_{\mathbf{k}} = \varepsilon_n(\mathbf{k})|\mathbf{k}\rangle|n\rangle_{\mathbf{k}}$ 。这里  $|\mathbf{k}\rangle$  是量子阱平面内的平面波,  $|n\rangle_{\mathbf{k}}$  用以标记子带和自旋态。如果我们取正交归一的基  $\{|n\rangle\}$  为  $\{|\mathbf{k}\rangle|n\rangle_{\mathbf{k}}\}$ , 则由该基构成的 Hilbert 空间称为 helix 自旋空间, 在该空间  $H_0$  是对角的。更多时候我们将基的自旋部分取定为固定动量  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$  如  $\Gamma$  点处的情形  $\{|\mathbf{k}\rangle|n\rangle_{\mathbf{k}_0}\}$  (该基是自旋  $\sigma_z$  矩阵的本征态) 构成 Hilbert 空间, 称为 collinear 自旋空间。在该自旋空间下, 由于自旋轨道耦合的存在,  $H_0$  一般不是对角的。这两个空间通过幺正变换联系。若在量子阱强约束下只考虑最低子带, 则可以记 helix 自旋空间的基为  $\{|\mathbf{k}+\rangle, |\mathbf{k}-\rangle\}$ , 而 collinear 自旋空间的基为  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ 。联系两个自旋空间的幺正变换矩阵为

$$U_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \mathbf{k}+ \rangle & \langle \uparrow | \mathbf{k}- \rangle \\ \langle \downarrow | \mathbf{k}+ \rangle & \langle \downarrow | \mathbf{k}- \rangle \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

$\Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = -\sum_{\mathbf{q}q_z} I(q_z)\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(\mathbf{r}, t)V(\mathbf{q}, q_z)I(-q_z)$  是 Hartree-Fock 自能。其中形状因子  $I_{n_1 n_2}(q_z) = \langle n_1 | e^{iq_z z} | n_2 \rangle$ ,  $V(\mathbf{q}, q_z)$  是库仑相互作用矩阵元。在单带的 collinear 自旋空间, 形状因子是对角的。

方程 (4.1) 等号右边的第二项是散射项,

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{scat}} = -\{S_{\mathbf{k}}(>, <) - S_{\mathbf{k}}(<, >) + S_{\mathbf{k}}(>, <)^{\dagger} - S_{\mathbf{k}}(<, >)^{\dagger}\}, \quad (4.4)$$

考虑进自旋守恒的散射如电子杂质散射、电子声子散射和电子电子散射, 在 Marko-

vian 近似 [262] 下,

$$\begin{aligned}
S_{\mathbf{k}}(>, <) = & \pi N_i \sum_{\mathbf{Q}, n_1 n_2} V_i(\mathbf{Q}) I(q_z) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^> T_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, n_1} V_i(-\mathbf{Q}) I(-q_z) T_{\mathbf{k}, n_2} \rho_{\mathbf{k}}^< \\
& \times \delta(\varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{n_2}(\mathbf{k})) + \pi \sum_{\mathbf{Q}\lambda, n_1 n_2} M_\lambda(\mathbf{Q}) I(q_z) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^> T_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, n_1} \\
& \times M_\lambda(-\mathbf{Q}) I(-q_z) T_{\mathbf{k}, n_2} \rho_{\mathbf{k}}^< [N_\lambda^<(-\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{n_2}(\mathbf{k}) - \omega_{\lambda, -\mathbf{Q}}) \\
& + N_\lambda^>(\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{n_2}(\mathbf{k}) + \omega_{\lambda, \mathbf{Q}})] + \pi \sum_{\mathbf{q} \mathbf{q}' \mathbf{q}'_z, n_1 n_2 n_3 n_4} V(\mathbf{q}, q_z) \\
& \times I(q_z) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^> T_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, n_1} V(-\mathbf{q}, q'_z) I(-q'_z) T_{\mathbf{k}, n_2} \rho_{\mathbf{k}}^< \text{Tr}[I(-q_z) \rho_{\mathbf{k}'}^> T_{\mathbf{k}', n_3} I(q'_z) \\
& \times T_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, n_4} \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^<] \delta(\varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{n_2}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{n_3}(\mathbf{k}') - \varepsilon_{n_4}(\mathbf{k}'-\mathbf{q})). \quad (4.5)
\end{aligned}$$

$S_{\mathbf{k}}(<, >)$  由  $S_{\mathbf{k}}(>, <)$  交换  $<$  和  $>$  得到。在上面的方程中,  $\mathbf{Q} = (\mathbf{q}, q_z)$ ,  $N_i$  是杂质浓度,  $V_i(\mathbf{Q})$  是电子杂质的库仑散射矩阵元,  $M_\lambda(\mathbf{Q})$  是电子声子散射的矩阵元,  $\lambda$  标记不同的声子支, 声子色散关系为  $\omega_{\lambda, \mathbf{Q}}$ .  $N_\lambda^<(\mathbf{Q})$  是声子的玻色统计。  $N_\lambda^>(\mathbf{Q}) = 1 + N_\lambda^<(\mathbf{Q})$ ,  $\rho_{\mathbf{k}}^< = \rho_{\mathbf{k}}$ ,  $\rho_{\mathbf{k}}^> = 1 - \rho_{\mathbf{k}}$ .  $T_{\mathbf{k}, n} = |\mathbf{k}\rangle |n\rangle_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \langle n| \langle \mathbf{k}|$ .

注意到在散射项中, 载流子的严格能谱  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  包括自旋轨道耦合的贡献。采用这种能谱的载流子的统计称为 helix 统计。这对数值处理散射项非常不利。在自旋轨道耦合造成的能量劈裂相对费米能来说很小时, 我们通常在  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  中忽略自旋轨道耦合的贡献, 这对应 collinear 统计。在 collinear 统计下, 对散射项的数值处理变得相对容易。这时候对于单带模型, 两个自旋带近似简并, 即  $\varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}) \approx \varepsilon_{n_2}(\mathbf{k}) \approx \varepsilon(\mathbf{k})$ 。利用条件  $\sum_n T_{\mathbf{k}, n} = 1$ , 方程 (4.5) 可以简化为

$$\begin{aligned}
S_{\mathbf{k}}(>, <) = & \pi N_i \sum_{\mathbf{Q}} V_i(\mathbf{Q}) I(q_z) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^> V_i(-\mathbf{Q}) I(-q_z) \rho_{\mathbf{k}}^< \delta(\varepsilon(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})) \\
& + \pi \sum_{\mathbf{Q}\lambda} M_\lambda(\mathbf{Q}) I(q_z) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^> M_\lambda(-\mathbf{Q}) I(-q_z) \rho_{\mathbf{k}}^< [N_\lambda^<(-\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}) - \omega_{\lambda, -\mathbf{Q}}) \\
& + N_\lambda^>(\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}) + \omega_{\lambda, \mathbf{Q}})] + \pi \sum_{\mathbf{q} \mathbf{q}' \mathbf{q}'_z} V(\mathbf{q}, q_z) I(q_z) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^> V(-\mathbf{q}, q'_z) \\
& \times I(-q'_z) \rho_{\mathbf{k}}^< \text{Tr}[I(-q_z) \rho_{\mathbf{k}'}^> I(q'_z) \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^<] \delta(\varepsilon(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}'-\mathbf{q})). \quad (4.6)
\end{aligned}$$

在 collinear 自旋空间，形状因子是对角的，上面的方程进一步简化为

$$\begin{aligned}
 S_{\mathbf{k}}(>, <) = & \pi N_i \sum_{\mathbf{q}} |U_{\mathbf{q}}|^2 \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^> \rho_{\mathbf{k}}^< \delta(\varepsilon(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})) \\
 & + \pi \sum_{\mathbf{Q}\lambda} |g_{\mathbf{Q}\lambda}|^2 \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^> \rho_{\mathbf{k}}^< [N_{\lambda}^<(-\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}) - \omega_{\lambda,-\mathbf{Q}}) \\
 & + N_{\lambda}^>(\mathbf{Q}) \delta(\varepsilon(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}) + \omega_{\lambda,\mathbf{Q}})] + \pi \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{q}}^2 \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^> \rho_{\mathbf{k}}^< \\
 & \times \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}'}^> \rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^<] \delta(\varepsilon(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}'-\mathbf{q})). \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

这里  $|U_{\mathbf{q}}|^2 = \sum_{q_z} V_i(\mathbf{Q})V_i(-\mathbf{Q})I(q_z)I(-q_z)$ ,  $|g_{\mathbf{Q}\lambda}|^2 = M_{\lambda}(\mathbf{Q})M_{\lambda}(-\mathbf{Q})I(q_z)I(-q_z)$  以及  $V_{\mathbf{q}} = \sum_{q_z} V(\mathbf{q}, q_z)I(q_z)I(-q_z)$ 。在 collinear 自旋空间，在无规相位近似 (random phase approximation, RPA) 下，电子和杂质的静态屏蔽库仑势为

$$V(\mathbf{q}, q_z) = V_0(\mathbf{Q})/\varepsilon(\mathbf{q}), \quad (4.8)$$

$$V_i(\mathbf{q}, q_z) = Z_i V_0(\mathbf{Q})/\varepsilon(\mathbf{q}). \quad (4.9)$$

对于准二维体系的量子阱，裸的库仑势  $V_0(\mathbf{Q}) = 4\pi e^2/Q^2$ 。  $Z_i$  是杂质所带的电荷。RPA 屏蔽

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = 1 - \sum_{q_z} V_0(\mathbf{Q})|I(q_z)|^2 \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - f_{\mathbf{k}\sigma}}{\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})}, \quad (4.10)$$

其中  $f_{\mathbf{k}\sigma}$  是密度矩阵的对角元，代表粒子分布。

方程 (4.1) 等号右边的第三项是载流子浓度梯度导致的空间扩散项，

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{dif}} = -\frac{1}{2} \{ \nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t), \nabla_{\mathbf{r}} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \}, \quad (4.11)$$

而最后一项是电场的驱动项，

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{dri}} = \frac{1}{2} \{ \nabla_{\mathbf{r}} E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t), \nabla_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \}. \quad (4.12)$$

这里  $\{A, B\} = AB + BA$  是反对易子。在扩散项中，我们通常不考虑自旋轨道耦合以及电场对能量  $E_{\mathbf{k}}$  的贡献，因而  $\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{dif}} = -\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ 。在 collinear 自旋空间，电场驱动项简化为  $\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{dri}} = e\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ 。

综上，在 collinear 自旋空间，如果电场沿着  $x$  方向，则动力学的自旋 Bloch 方程

通常具有如下形式

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & -i[H_{\text{so}}(\mathbf{k}) + H_z(\mathbf{B}) + \Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t), \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)] - \partial_{k_x} \varepsilon(\mathbf{k}) \partial_x \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) + eE \partial_{k_x} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \\ & + \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{scat}}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

这里  $H_{\text{so}}(\mathbf{k}) = \mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  是自旋轨道耦合,  $H_z(\mathbf{B}) = g\mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2$  是 Zeeman 项。在  $H_{\text{so}}(\mathbf{k}) + H_z(\mathbf{B})$  的自旋本征态构成的 helix 空间, 由于基变换通过幺正矩阵 (4.3) 联系, 因而此时动力学的自旋 Bloch 方程变为

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & -i \left[ \frac{1}{2} (\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k})) \sigma_z + \Sigma_{\text{HF}}^h(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t), \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) \right] - \partial_{k_x} \varepsilon(\mathbf{k}) \partial_x \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) \\ & + eE \partial_{k_x} \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) + eE [U_{\mathbf{k}}^\dagger \partial_{k_x} U_{\mathbf{k}}, \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t)] + \left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{scat}}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

这里  $\rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) = U_{\mathbf{k}}^\dagger \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) U_{\mathbf{k}}$ , 是 helix 自旋空间的密度矩阵。散射项  $\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}^h(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{scat}}$  由方程 (4.13) 中的散射项  $\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right|_{\text{scat}}$  在  $U_{\mathbf{k}}$  下的幺正变换得到。该表象下的 Hartree-Fock 自能也经过幺正变换而得到。

## 4.2 时间域的自旋弛豫机制

在前面的章节 1.4 中, 我们对主要的自旋弛豫机制已经做了简要介绍。这里我们在动力学自旋 Bloch 方程的框架下进一步考虑这些弛豫机制。

### 4.2.1 D'yakonov-Perel' 自旋弛豫机制

在不考虑散射以及 Hartree-Fock 自能时, 时间域里的动力学自旋 Bloch 方程具有自由演化解

$$\rho_{\mathbf{k}}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{h}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} t/2} \rho_{\mathbf{k}}(0) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{h}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} t/2}, \quad (4.15)$$

其中

$$\mathbf{h}_{\mathbf{k}} = 2\mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}} + g\mu_B \mathbf{B}. \quad (4.16)$$

这个解体现出时间域里自旋轨道耦合导致的自旋进动的非均匀扩展。在没有散射的情况下, 非均匀扩展的自旋进动的干涉效应导致可逆的自旋弛豫。但是, 在散射存在时, 这个过程变为不可逆的。

我们以具有抛物能谱和 Rashba 自旋轨道耦合的二维电子系统为例, 从动力学

自旋 Bloch 方程出发，解析上研究在强的弹性散射区域，DP 机制下的自旋弛豫。在 collinear 自旋空间，对于无外场（电场和磁场）的空间均匀的体系，只考虑电子-杂质散射，并且忽略 Hartree-Fock 自能，动力学自旋 Bloch 方程为

$$\partial_t \rho_{\mathbf{k}}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \rho_{\mathbf{k}}(t)] - \frac{2\pi N_i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} |U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) [\rho_{\mathbf{k}}(t) - \rho_{\mathbf{k}'}(t)]. \quad (4.17)$$

这里  $\mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}} = \alpha_{\text{R}}(-k_y, k_x, 0)$ ，是 Rashba 自旋轨道耦合提供的有效磁场。 $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m^*$  是电子的动能。

对于方程 (4.17)，将  $\rho_{\mathbf{k}}(t)$  关于角度  $\theta_{\mathbf{k}}$  做傅立叶变换，即  $\rho_{\mathbf{k}}(t) = \sum_l \rho_k^l(t) e^{il\theta_{\mathbf{k}}}$ ，我们得到

$$\partial_t \rho_k^l(t) = -\frac{\alpha_{\text{R}} k}{2\hbar} [\sigma_+, \rho_k^{l+1}(t)] + \frac{\alpha_{\text{R}} k}{2\hbar} [\sigma_-, \rho_k^{l-1}(t)] - \frac{\rho_k^l(t)}{\tau_k^l}, \quad (4.18)$$

这里  $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$ ，且

$$\frac{1}{\tau_k^l} = \frac{m^* N_i}{2\pi \hbar^3} \int_0^{2\pi} d\theta |U_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos l\theta), \quad (4.19)$$

其中  $|U_{\mathbf{q}}|^2$  只依赖于  $|\mathbf{q}| = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ 。在强散射条件下保留  $\rho_k^l(t)$  的  $l = 0, \pm 1$  的最低三阶，并且利用初始条件  $\rho_k^l(0) = \delta_{l0} \rho_k^0(0)$ ，我们可以得到关于  $\rho_k^0(t)$  的二阶微分方程，

$$\partial_t^2 \rho_{\mu k}^0(t) + \frac{1}{\tau_k^1} \partial_t \rho_{\mu k}^0(t) + \frac{\alpha_{\text{R}}^2 k^2}{2\hbar^2} [\sigma_x, [\sigma_x, \rho_{\mu k}^0(t)]] + \frac{\alpha_{\text{R}}^2 k^2}{2\hbar^2} [\sigma_y, [\sigma_y, \rho_{\mu k}^0(t)]] = 0, \quad (4.20)$$

以及附加的初始条件  $\partial_t \rho_k^0(0) = 0$ 。定义自旋极化矢量  $\mathbf{S}_k^0(t) = \text{Tr}[\rho_k^0(t) \boldsymbol{\sigma}]$ ，我们可以从上面的方程得到  $\mathbf{S}_k^0(t)$  满足的方程

$$\left[ \partial_t^2 + \frac{1}{\tau_k^1} \partial_t + \frac{2\alpha_{\text{R}}^2 k^2}{\hbar^2} (1 + \delta_{\alpha z}) \right] S_{k\alpha}^0(t) = 0, \quad (4.21)$$

这里  $\alpha = x, y, z$ 。在初始条件  $\partial_t S_{k\alpha}^0(0) = 0$  下， $S_{k\alpha}^0(t)$  的解为

$$S_{k\alpha}^0(t) = \frac{S_{k\alpha}^0(0)}{2} \left[ \left( 1 + \frac{1}{\sqrt{1-c_\alpha^2}} \right) e^{-\frac{t}{2\tau_k^1}(1-\sqrt{1-c_\alpha^2})} + \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1-c_\alpha^2}} \right) e^{-\frac{t}{2\tau_k^1}(1+\sqrt{1-c_\alpha^2})} \right], \quad (4.22)$$

其中  $c_\alpha = 2\sqrt{2(1+\delta_{\alpha z})} \alpha_{\text{R}} k \tau_k^1 / \hbar$ 。当散射足够强使得  $c_\alpha \ll 1$  时，有

$$S_{k\alpha}^0(t) \approx S_{k\alpha}^0(0) e^{-\frac{t}{4\tau_k^1/c_\alpha^2}} \equiv S_{k\alpha}^0(0) e^{-\frac{t}{\tau_\alpha}}. \quad (4.23)$$

因而，沿着  $x$  和  $y$  方向的自旋弛豫时间为  $\tau_x = \tau_y = \hbar^2/(2\alpha_R^2 k^2 \tau_k^1)$ ，而沿着  $z$  方向的自旋弛豫时间为  $\tau_z = \hbar^2/(4\alpha_R^2 k^2 \tau_k^1)$ 。平面内和平面外的弛豫体现出各向异性。从方程 (4.19) 可以看出， $\tau_k^1$  实际上就是电子杂质所贡献的动量散射时间  $\tau_p(k)$ 。自旋弛豫时间和动量弛豫时间成反比，是 DP 机制在强散射区域的典型行为，它来源于散射对非均匀扩展的抑制效应。在章节 1.4.2 中介绍的单体公式定性给出了这个性质。但是，完整的动力学自旋 Bloch 方程可以将所有的散射包括库仑散射严格地定量考虑进来。从定性上来说，它导致的效果是， $\tau_p(k)$  被修正为  $\tau_p^*(k)$ ，因而各种散射（包括库仑散射）对  $\tau_p^*(k)$  的影响导致自旋弛豫的丰富行为。

在弱散射区，和上面的过程类似做解析解不一定可行，因为此时在傅立叶变换后只保留最低的三阶不一定保证结果的收敛。但是，由解 (4.22) 出发可以定性地了解弱散射区的自旋弛豫的行为。在  $c_\alpha \gg 1$  的弱散射区，该解变为

$$S_{k\alpha}^0(t) = S_{k\alpha}^0(0) e^{-\frac{t}{2\tau_k^1}} \left[ \cos \frac{\sqrt{c_\alpha^2 - 1}t}{2\tau_k^1} + \frac{1}{\sqrt{c_\alpha^2 - 1}} \sin \frac{\sqrt{c_\alpha^2 - 1}t}{2\tau_k^1} \right]. \quad (4.24)$$

这个解表明，在弱散射区，自旋极化边进边衰减。动量散射提供自旋弛豫的通道，因而自旋弛豫率  $\sim$  动量散射率。在弱散射区对动力学自旋 Bloch 方程严格的数值解体现出了这种性质 [11, 281, 284]。

### 4.2.2 Elliott-Yafet 自旋弛豫机制

上面考虑 DP 自旋弛豫机制的时候，是直接从所要考察的带所构成的子空间里的有效哈密顿量（包含自旋轨道耦合）出发的。在前面的章节 2.1.3 和 2.1.4 中，我们介绍了从描述多带的  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量通过 Löwdin 块对角化 [333, 334] 得到子空间有效哈密顿量的过程。这个过程实际上是对多带的  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量 [如 Kane 哈密顿量  $H_{8 \times 8}(\mathbf{k})$ ] 做么正变换，使得  $\tilde{H}_{8 \times 8}(\mathbf{k}) \equiv e^{-S_{\mathbf{k}}} H_{8 \times 8}(\mathbf{k}) e^{S_{\mathbf{k}}}$  块对角化，从而在所关注的子空间内将该空间与其它空间的耦合有效地考虑进来 [333]。但是，在这个过程中，基函数也相应地做了  $e^{-S_{\mathbf{k}}}$  的么正变换，使得基的自旋部分不再是原来的角动量算符的本征态，而会引入其它带的自旋部分的混合，从而构成“准自旋”。把这个效应考虑进来后，任何自旋守恒的散射都会在不同的“准自旋”态间造成翻转。这就是在前面章节 1.4.1 中所介绍的 EY 自旋弛豫机制中的 Elliott 过程。在动力学自旋 Bloch 方程中，考虑进这种由波函数的混合导致的自旋翻转散射，就可以将 Elliott 机制囊括进来。

在 Löwdin 块对角化的过程中， $S_{\mathbf{k}}$  矩阵是反厄米的，即  $S_{\mathbf{k}}^\dagger = -S_{\mathbf{k}}$  [333]。我们假设为了从  $(m+n) \times (m+n)$  维度的空间得到  $m \times m$  维度子空间的有效哈密顿量，则在 Löwdin 块对角化的过程中所采用的  $S_{\mathbf{k}}$  具有矩阵形式

$$S_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & s_{m \times n}(\mathbf{k}) \\ -s_{m \times n}^\dagger(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

在  $e^{-S_{\mathbf{k}}}$  么正变换的  $S_{\mathbf{k}}$  的零阶和二阶贡献下,  $m \times m$  子空间内不同动量态间的散射矩阵元为  $\tilde{V}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ , 其中

$$\Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = 1 - \frac{1}{2}[s_{m \times n}(\mathbf{k})s_{m \times n}^\dagger(\mathbf{k}) - 2s_{m \times n}(\mathbf{k})s_{m \times n}^\dagger(\mathbf{k}') + s_{m \times n}(\mathbf{k}')s_{m \times n}^\dagger(\mathbf{k}')]. \quad (4.26)$$

这里  $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$  是纯的自旋态下的散射矩阵元, 是正比于单位阵的。 $\Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$  中非 1 的部分来自 Elliott 机制下长程相互作用的贡献, 一般是非对角的。在不考虑这一机制时,  $\Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$  取为 1。

对于体的 III-V 族半导体材料, 在从  $8 \times 8$  的 Kane 哈密顿量出发块对角化到导带电子的过程中, 可以得到

$$\Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = 1 - i\lambda_c(\mathbf{k} \times \mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.27)$$

其中  $\lambda_c = \frac{\eta(1-\eta/2)}{3m_e E_g(1-\eta/3)}$  [参考方程 (1.10)]。而对于半导体量子阱, 以章节 2.1.4 中介绍的 Ge/SiGe 量子阱为例, 如果要考虑最低重空穴子带的 Elliott 长程相互作用过程 [326], 则

$$\Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = 1 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=l,s} \sum_{n=1}^{+\infty} [s_{2 \times 2}^{h0\alpha n}(\mathbf{k})s_{2 \times 2}^{h0\alpha n \dagger}(\mathbf{k}) - 2s_{2 \times 2}^{h0\alpha n}(\mathbf{k})s_{2 \times 2}^{h0\alpha n \dagger}(\mathbf{k}') + s_{2 \times 2}^{h0\alpha n}(\mathbf{k}')s_{2 \times 2}^{h0\alpha n \dagger}(\mathbf{k}')], \quad (4.28)$$

其中

$$s_{2 \times 2}^{h0\alpha n}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} -\frac{\langle \Psi_{1h0} | H_L^{(l)} | \Psi_{1\alpha n} \rangle}{E_0^{(h)} - E_n^{(\alpha)}} & -\frac{\langle \Psi_{1h0} | H_L^{(l)} | \Psi_{2\alpha n} \rangle}{E_0^{(h)} - E_n^{(\alpha)}} \\ -\frac{\langle \Psi_{2h0} | H_L^{(l)} | \Psi_{1\alpha n} \rangle}{E_0^{(h)} - E_n^{(\alpha)}} & -\frac{\langle \Psi_{2h0} | H_L^{(l)} | \Psi_{2\alpha n} \rangle}{E_0^{(h)} - E_n^{(\alpha)}} \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

动力学的自旋 Bloch 方程将自旋翻转的散射项包含进来, 需要做相应的修正。以电子杂质散射为例, 方程 (4.6) 中的对应项需要改写为

$$S_{\mathbf{k}}^{\text{ei}}(>, <) = \pi N_i \sum_{\mathbf{Q}} V_i(\mathbf{Q}) \Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}} I(q_z) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^> V_i(-\mathbf{Q}) \Lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}} I(-q_z) \rho_{\mathbf{k}}^< \delta(\varepsilon(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})). \quad (4.30)$$

这里面既包含自旋守恒的散射, 也包含自旋翻转的散射。

### 4.2.3 其它自旋弛豫机制

BAP 机制是电子空穴的交换作用导致的, 它也可以在动力学自旋 Bloch 方程中考虑进来。文献 [278, 300] 给出了动力学自旋 Bloch 方程中电子空穴自旋翻转散射的形

式。此外，随机的自旋轨道耦合导致的自旋翻转散射可以认为是来自自旋依赖的势散射，在处理上类似于电子杂质散射，但是散射矩阵元在 collinear 自旋空间不再是对角的。在章节 1.4.4 中我们已经在密度矩阵的描述下给出了随机自旋轨道耦合导致的翻转散射的实例。在后面的章节 7.1 中，我们会在动力学自旋 Bloch 方程的框架下包含进随机 Rashba 场导致的自旋翻转散射项，对石墨烯里的自旋弛豫做具体的研究。

### 4.3 空间域的输运过程中的自旋弛豫机制

在空间域非均匀的体系中，假设系统在  $x$  方向有浓度梯度或者有外加电场，动力学自旋 Bloch 方程在 collinear 自旋空间由方程 (4.13) 给出。我们先不考虑方程中的散射项、电场驱动项以及 Hartree-Fock 自能，则该方程有稳态解

$$\rho_{\mathbf{k}}(x, t = +\infty) = e^{-i\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} x/2} \rho_{\mathbf{k}}(0, t = +\infty) e^{i\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} x/2}, \quad (4.31)$$

其中

$$\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} = \frac{2\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}} + g\mu_B \mathbf{B}}{\partial_{k_x} \varepsilon(\mathbf{k})}. \quad (4.32)$$

注意到与时间域不同，在空间域里自旋扩散的进动频率不仅与有效磁场有关，还与载流子的群速度有关。这个动量依赖的空间进动频率提供自旋输运过程中的非均匀扩展，在有散射的情况下，导致输运过程中不可逆的自旋弛豫。

#### 4.3.1 D'yakonov-Perel' 自旋弛豫机制下的自旋输运

下面我们仍旧以具有抛物能谱和 Rashba 自旋轨道耦合的二维电子系统为例，展示在有自旋轨道耦合提供的有效磁场的情况下的自旋扩散性质。没有外加电场。

在 collinear 自旋空间，只考虑强的电子杂质散射，忽略 Hartree-Fock 自能，描述沿着  $x$  方向的扩散的动力学自旋 Bloch 方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar} [\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \rho_{\mathbf{k}}(x, t)] - \frac{2\pi N_i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} |U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) [\rho_{\mathbf{k}}(x, t) - \rho_{\mathbf{k}'}(x, t)] \\ & - \frac{\hbar k}{m^*} \cos \theta_{\mathbf{k}} \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial x}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

对稳态的动力学自旋 Bloch 方程做关于幅角  $\theta_{\mathbf{k}}$  的傅立叶变换，得到  $\rho_{\mathbf{k}}^l(x)$  [ $\rho_{\mathbf{k}}^l(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(x) e^{-il\theta_{\mathbf{k}}}$  以及  $\rho_{\mathbf{k}}(x) \equiv \rho_{\mathbf{k}}(x, +\infty)$ ] 满足的方程

$$\partial_x \sum_{l_0=\pm 1} \rho_{\mathbf{k}}^{l+l_0}(x) + \gamma[\sigma_+, \rho_{\mathbf{k}}^{l+1}(x)] - \gamma[\sigma_-, \rho_{\mathbf{k}}^{l-1}(x)] + \frac{2m^*}{\hbar k} \frac{\rho_{\mathbf{k}}^l(x)}{\tau_{\mathbf{k}}^l} = 0 \quad (4.34)$$



这里  $\gamma = \alpha_{\text{R}} m^* / \hbar^2$ 。保留  $\rho_k^l(x)$  的最低三阶，得到只含  $\rho_k^{0,\pm 1}(x)$  的方程

$$\partial_x \sum_{l_0=\pm 1} \rho_k^{l_0}(x) + \gamma[\sigma_+, \rho_k^1(x)] - \gamma[\sigma_-, \rho_k^{-1}(x)] = 0, \quad (4.35)$$

$$\partial_x \rho_k^0(x) - \gamma[\sigma_-, \rho_k^0(x)] + \frac{2m^*}{\hbar k} \frac{\rho_k^1(x)}{\tau_k^1} = 0, \quad (4.36)$$

$$\partial_x \rho_k^0(x) + \gamma[\sigma_+, \rho_k^0(x)] + \frac{2m^*}{\hbar k} \frac{\rho_k^{-1}(x)}{\tau_k^1} = 0. \quad (4.37)$$

从这些方程可以得到  $\rho_k^0(x)$  满足的二阶微分方程，

$$\partial_x^2 \rho_k^0(x) + 2i\gamma[\sigma_y, \partial_x \rho_k^0(x)] - \gamma^2[\sigma_x, [\sigma_x, \rho_k^0(x)]] - \gamma^2[\sigma_y, [\sigma_y, \rho_k^0(x)]] = 0. \quad (4.38)$$

注意到从一开始只有  $\rho_k^l(x)$  最低的三阶被考虑，电子杂质散射时间不出现在上面的方程中。这表明具有 Rashba 自旋轨道耦合时，在强散射极限，自旋扩散对散射不敏感。自旋极化矢量  $\mathbf{S}_k^0(x) \equiv \text{Tr}[\rho_k^0(x)\boldsymbol{\sigma}]$  满足方程

$$\begin{pmatrix} \partial_x^2 - 4\gamma^2 & 0 & -4\gamma\partial_x \\ 0 & \partial_x^2 - 4\gamma^2 & 0 \\ 4\gamma\partial_x & 0 & \partial_x^2 - 8\gamma^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{kx}^0(x) \\ S_{ky}^0(x) \\ S_{kz}^0(x) \end{pmatrix} = 0. \quad (4.39)$$

利用边界条件可以从上面的方程解出  $\mathbf{S}_k^0(x)$ 。所有不同电子态贡献的总的自旋信号为

$$\mathbf{S}(x) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{+\infty} dk \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}} k \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(x)\boldsymbol{\sigma}] = \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} dk k \mathbf{S}_k^0(x). \quad (4.40)$$

接下来我们在三种典型的边界条件下给出  $\mathbf{S}(x)$  的解。

对于注入的自旋极化沿着  $x$  方向的情况，边界条件为 (I)  $\mathbf{S}_k^0(0) = (S_k^0(0), 0, 0)$  以及  $\mathbf{S}_k^0(+\infty) = 0$ ，我们有解

$$\mathbf{S}(x) = S(0)e^{-x/l_x} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \Delta^2} \sin(\omega x + \phi) \\ 0 \\ c_1 \sin(\omega x) \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

对于注入的自旋极化沿着  $y$  方向的情况，边界条件为 (II)  $\mathbf{S}_k^0(0) = (0, S_k^0(0), 0)$  以及  $\mathbf{S}_k^0(+\infty) = 0$ ，解为

$$\mathbf{S}(x) = S(0)e^{-x/l_y} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.42)$$

对于注入的自旋极化沿着  $z$  方向的情况，边界条件为 (III)  $\mathbf{S}_k^0(0) = (0, 0, S_k^0(0))$  以及  $\mathbf{S}_k^0(+\infty) = 0$ , 解为

$$\mathbf{S}(x) = S(0)e^{-x/l_z} \begin{pmatrix} c_2 \sin(\omega x) \\ 0 \\ -\sqrt{1 + \Delta^2} \sin(\omega x - \phi) \end{pmatrix}. \quad (4.43)$$

在上面的方程中  $S(0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} dk k S_k^0(0)$ , 以及

$$l_x = l_z = \frac{\sqrt{7}}{(2\sqrt{2} - 1)\sqrt{1 + 2\sqrt{2}\gamma}} \frac{1}{\gamma}, \quad (4.44)$$

$$l_y = \frac{1}{2\gamma}, \quad (4.45)$$

$$\omega = \sqrt{1 + 2\sqrt{2}\gamma} \frac{1}{\gamma}. \quad (4.46)$$

其中  $c_1 = -\frac{4}{(1+\sqrt{2})\sqrt{1+2\sqrt{2}}}$ ,  $c_2 = \frac{(20\sqrt{2}-24)\sqrt{1+2\sqrt{2}}}{7}$ ,  $\Delta = \frac{8\sqrt{2}-11}{\sqrt{7}}$  以及  $\phi = \arctan \frac{1}{\Delta}$ 。

由于在 Rashba 自旋轨道耦合下,  $\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} = 2\gamma(-\tan \theta_{\mathbf{k}}, 1, 0)$ , 因而  $\langle \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} \rangle = 2\gamma(0, 1, 0)$ 。因此, 在输运的过程中, 自旋感受到沿着  $y$  方向的静磁场, 从而在  $x-z$  平面内进动, 而在  $y$  方向只有指数衰减, 没有进动。从上面的解中我们还可以看到, 在 Rashba 自旋轨道耦合下, 如果系统处在强散射区, 自旋的输运对散射不敏感。在第 8 章, 我们会在具有 Rashba 自旋轨道耦合的石墨烯中研究自旋的扩散。虽然石墨烯中的电子具有线性能谱, 但是在自旋扩散中也表现出了同样的性质。

对施加了电场后的输运行为的研究, 可以参考第 8 章。一般来说, 施加电场后, 自旋极化在空间的进动频率不改变, 但是当电场方向和电子自旋的注入方向反平行 (平行) 时, 自旋输运长度会变长 (短) [276, 493]。对于有自旋翻转散射存在时 (EY 或者类 EY 机制主导) 的自旋输运, 可以参考章节 8.6。

### 4.3.2 静磁场对自旋输运的影响

在没有 Dresselhaus 或者 Rashba 自旋轨道耦合提供的有效磁场时, 不管有没有外加静磁场, 在时间域里都没有 DP 机制下的自旋弛豫, 因为不存在非均匀扩展。但是在输运过程中则不一样。从方程 (4.32) 可以看出, 即使没有动量依赖的有效磁场, 单纯的静磁场也会由于群速度对动量的依赖提供非均匀扩展,

$$\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} = \frac{g\mu_B \mathbf{B}}{\partial_{k_x} \varepsilon(\mathbf{k})}. \quad (4.47)$$

这个性质最早由 Weng 和 Wu 在 2002 年指出 [274]。图 4-1 给出了只有静磁场的情况下，纯粹由这种动量依赖的空间进动的干涉效应导致的自旋极化的衰减 [274]。在第 6 章，我们会具体的在对称的 Si/SiGe 量子阱中研究没有 DP 自旋弛豫机制时静磁场导致的运输过程中的自旋弛豫 [332]。

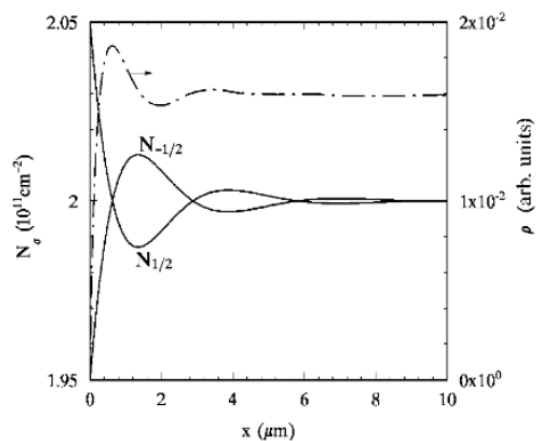


图 4-1: 实线: 在只有静磁场下, 自旋依赖的电子浓度在梯度方向的分布。自旋极化的衰减纯粹由动量依赖的空间进动的干涉效应造成。摘自文献 [274]。

## 第五章 半导体量子阱中的自旋弛豫

### 5.1 研究背景

在这一章里我们研究半导体量子阱中的自旋弛豫。在这方面已经有了比较多的实验和理论研究。对于 III-V 族  $n$  型或者本征型半导体的量子阱结构中的导带电子，通常是 DP 机制主导自旋弛豫；而对 III-V 族  $p$  型半导体的量子阱结构中的导带电子，个别情况下 BAP 机制会很重要甚至超过 DP 机制 [278]。对于 III-V 族半导体量子阱结构中的价带空穴，由于子带间的劈裂减弱了带间不同自旋的混合，EY 机制减弱而 DP 机制会占主导 [281, 326]。对于 IV 族半导体的量子阱结构，如果量子阱是对称的，则不存在 DP 机制，EY 机制可能占主导，同时 Sherman 指出涨落的远程掺杂导致的随机的 Rashba 自旋轨道耦合也会贡献自旋的弛豫 [268]。但是，如果量子阱是非对称的，则会引入 Rashba 型的自旋轨道耦合 [301, 328]，DP 机制可以主导自旋的弛豫 [301, 329]。

在量子阱结构中，自旋弛豫有很大的可操控性，并因此具有十分丰富的行为。比如，由于量子阱的结构因素，其生长方向可以决定二维电子系统的自旋轨道耦合形式，而阱宽可以影响自旋轨道耦合的强度以及参与贡献的子带数目。同时，这种结构上的限制，以及 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的协同作用，会导致自旋弛豫的各向异性。此外，门电压不仅可以调控 Rashba 自旋轨道耦合的强度，还能改变电子的浓度。应力也可以用来调节自旋轨道耦合。这些性质吸引了人们对半导体量子阱里自旋弛豫研究的热情，导致很多物理现象的发现以及新构想的提出。下面对关于半导体量子阱里的自旋弛豫的一些具有代表性的实验和理论的研究做一个简要介绍。

在量子阱结构中，人们从实验上验证了 DP 机制导致的自旋弛豫对散射的依赖行为。Brand 等人 [297] 和 Leyland 等人 [296] 在高迁移率的  $n$  型 (001) GaAs/AlGaAs 量子阱中，在低温下观察到了弱散射区的电子自旋极化的进动和衰减行为，同时随着温度的上升，还观察到了从弱散射区到强散射区转变过程中自旋弛豫对动量弛豫的依赖关系从  $\tau_s \sim \tau_p$  到  $\tau_s \sim \tau_p^{-1}$  的转变。

沿不同方向生长的量子阱中的自旋弛豫性质如各向异性、门电压调控等被非常广泛地研究。在  $n$  型 (001) GaAs/AlGaAs 的非对称量子阱中，Averkiev 等人观察到了沿不同晶向的电子自旋弛豫的各向异性，并且从这个各向异性反推出该系统中 Rashba 自旋轨道耦合是 Dresselhaus 自旋轨道耦合强度的四倍 [494]。其它的实验在这个体系中也观察到了自旋弛豫的各向异性 [495–498]。需要指出的是，在这个体系中，如果只考虑 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的线性阶而且认为它们的强度相同，那么

总的有效磁场会沿着  $[110]$  或者  $[1\bar{1}0]$  方向，因此在不考虑 DP 之外的其它弛豫机制的情况下，在  $[110]$  或  $[1\bar{1}0]$  方向上会有无穷长的自旋弛豫时间 [493, 499–501]。在对称的 (110) GaAs 量子阱中，由于 Dresselhaus 自旋轨道耦合提供的有效磁场沿着阱的生长方向 [502, 503]，因此在最低子带占据下，沿着阱的生长方向没有 DP 机制导致的自旋弛豫。Ohno 等人在本征激发的 (110) GaAs 量子阱中观察到了沿着阱的生长方向的长达几个纳秒的电子的自旋弛豫时间 [作为对比，本征激发的 (001) GaAs 量子阱中对应的自旋弛豫时间在 10-100 ps 量级，见章节 5.2]，并且认为这个有限的自旋弛豫时间是由 BAP 机制导致的 [224]。Müller 等人 *n* 型的 (110) GaAs 量子阱中测得沿着阱的生长方向的长达几十纳秒的自旋弛豫时间。在这个系统中，BAP 机制被排除，Müller 等人认为这个有限的自旋弛豫时间是平面内的随机 Rashba 场造成的 [236]。这种猜测后来被 Zhou 和 Wu 从完全微观的动力学自旋 Bloch 方程出发的理论计算所验证 [271]。但是 Zhou 和 Wu 同时也指出，对于这种体系，虚的带间散射协同带间的自旋轨道耦合也是一种可能的自旋弛豫机制，且它在迁移率足够低的样品中很重要 [327]。对于 (111) GaAs 量子阱，导带的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的动量一阶项具有相同的形式。因此在合适的阱宽和门电压下，两种自旋轨道耦合相消，电子的自旋弛豫时间被期待非常长 [504]。Sun 等人考虑进 Dresselhaus 自旋轨道耦合的三阶项，对此问题做了研究。他们发现在电子自旋弛豫时间对浓度或者温度的依赖中会出现由于自旋轨道耦合的相消效应导致的峰（10-100 ns 的量级） [306]。

相对于电子自旋弛豫的研究，对半导体量子阱中的空穴的自旋弛豫的研究还比较少。Lü 等人研究了 *p* 型 (001) GaAs 量子阱中空穴的自旋弛豫 [281]。他们的研究表明，Dresselhaus 自旋轨道耦合对动量的依赖直接影响到系统自旋进动的非均匀扩展随着浓度或者温度调节的变化，从而影响到自旋的弛豫。他们的研究还发现，随着杂质浓度的增大，空穴系统在从弱散射区进入强散射区时，自旋弛豫时间有一个谷的出现。最近，在 *p* 型 (111) GaAs/AlAs 量子阱中，Wang 和 Wu 研究了重空穴的自旋弛豫 [326]。他们发现，在合适的门电压下，由 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合贡献的总的有效磁场的平面内分量可以被强烈的压制，因此在空穴自旋弛豫时间对门电压的依赖中会出现一个峰，而且这个峰可以达到 100 ns 的量级。同时，他们的研究还发现，在这个系统中 DP 机制占主导，EY 机制可以忽略。

库仑相互作用对量子阱中自旋弛豫的影响也被考察。Zhou 和 Wu 在动力学自旋 Bloch 方程的框架下预言，在高迁移率低浓度的样品中，占主导地位的库仑散射的强度对温度的非单调依赖会导致自旋弛豫时间在温度依赖上的一个峰，这个峰出现在从简并区到非简并区的过渡位置 [277]。后来实验证实了这个预言 [294]，表明了多体效应对自旋弛豫的重要性。库仑散射的效应在自旋弛豫对浓度的依赖中也有体现 [279, 300–306]。Aleksiejunas 等人 [505] 在本征的 GaAs 量子阱中观察到随电子浓度的增大，电子自旋弛豫时间先变大后变小的现象。此外，电子间的交换相互作用提供的库仑 Hartree–Fock 自能等效于一个沿自旋极化方向的有效磁场 [307]。当自旋极化很大的时候，这个磁场会抑制自旋轨道耦合导致的自旋进动的非均匀扩展，从而抑

制自旋弛豫 [11, 307]。该效应首先被 Weng 和 Wu 从理论上预言 [307]，之后被实验证实 [309–312]。

外场对半导体量子阱中的自旋弛豫的影响也被研究。Weng 等人从理论上研究了量子阱中存在平面内电场时的电子自旋弛豫 [506, 507]。他们发现，电场一方面造成电子的热化，另一方面造成质心的漂移。这样会同时导致电声散射和自旋进动的非均匀扩展的加强。在低电场区，散射增强的效应占主导，而到了高电场区，非均匀扩展增强占主导。因而在强散射区，随着电场的增大，自旋弛豫时间先变长后变短 [506, 508]。此外，由于质心的漂移，自旋轨道耦合会诱导出一个净磁场，从而导致总的自旋极化的进动 [506]，并混合平面内和平面外的自旋弛豫（见下面对磁场的效应的讨论）。在电场更高的时候（比如，3 kV/cm），电子会占据高的子带，多子带效应 [507] 或者多能谷效应 [490] 需要考虑进来。磁场对自旋弛豫的影响也被研究。如果在没有磁场时，量子阱面内和面外的自旋是指指数形式的弛豫（假设弛豫率分别为  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$ ），那么在大于  $|\gamma_1 - \gamma_2|/(g\mu_B)$  的 Voigt 构型的磁场下，垂直于磁场方向的自旋弛豫会发生混合，且具有弛豫率  $(\gamma_1 + \gamma_2)/2$  [503]。如果磁场没有这么大，不能充分混合，则垂直于磁场的平面内的弛豫是双指数行为。但是在平行于磁场的方向，自旋弛豫率会下降为原来的  $1/(1 + \omega^2\tau_p^2)$  [1]。这里  $\omega$  是 Larmor 进动频率而  $\tau_p$  是动量弛豫时间。最近 Zhou 等人发现，在外加磁场很大以至于远大于垂直于它的自旋轨道耦合提供的有效磁场时，自旋弛豫对动量散射的依赖会表现出和常规 DP 机制下不一样的行为。首先，即使在强散射区域，沿着磁场方向的自旋弛豫时间和动量弛豫时间成正比，因此 DP 机制体现出类 EY 机制的行为。其次，在弱（强）散射区域，垂直于磁场方向的自旋弛豫时间却和动量弛豫时间成反（正）比，这和无磁场下的 DP 机制的行为正好相反 [292]。

此外，Sherman 小组研究了量子阱中随机的自旋轨道耦合下的自旋弛豫 [252, 267, 268]。这种随机性来源于带电杂质的无规分布或者阱宽的涨落。在电子的平均自由程大于随机自旋轨道耦合的关联长度时（高迁移率的样品中容易满足这一条件），自旋轨道耦合的随机涨落导致自旋翻转的散射。在其它自旋弛豫机制不存在或者不重要时，这种机制变得重要。

在本章中，我们首先从实验和理论上研究了本征的 GaAs 量子阱中电子的自旋弛豫对浓度的依赖 [279]，然后研究 GaAs 量子阱中高的电场下包含多个能谷的电子的自旋弛豫 [490]，接着研究了非对称的 Si/SiGe 以及 Ge/SiGe 量子阱中空穴的自旋弛豫 [301]。最后，我们在高电场下，将声子处理成非平衡的，考察非平衡声子对热化电子的自旋弛豫的影响 [509]。

## 5.2 室温下本征 GaAs 量子阱中电子自旋弛豫对浓度的依赖

在这一节里我们研究室温下本征的 GaAs 量子阱中电子的自旋弛豫对浓度的依赖。这是和中山大学的 Lai 实验组合作的工作 [279]。通过时间分辨的圆偏振的泵浦—探测实验，我们发现，在线性 Dresselhaus 自旋轨道耦合项占主导的低浓度区，自旋弛豫时

间随着载流子浓度（电子和空穴浓度相同）的增大而变长，但是在浓度足够大从而三次方的 Dresselhaus 自旋轨道耦合占主导的时候，自旋弛豫时间倾向于随浓度变大而变短。这些性质和 Lü 等人对自旋弛豫关于浓度依赖的理论预测是一致的 [281]。我们利用考虑进 DP 和 BAP 自旋弛豫机制的动力学自旋 Bloch 方程进行了完整的计算，很好的解释了上述实验现象。

### 5.2.1 样品和测量

我们研究的二维 GaAs 量子阱样品是利用分子束外延方法沿着 (001) 方向 ( $z$  方向) 生长的具有 11 个周期结构的多层量子阱。每一个周期包括 10 nm 宽的 GaAs 以及 6 nm 宽的  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  势垒层。为了光学上的透射测量，衬底通过打磨和选择性的化学刻蚀而清除。我们利用广泛采用的时间分辨的圆偏振光的泵浦—探测手段 [510–513] 来激发自旋极化和研究自旋弛豫。飞秒激光由 Ti:sapphire 激光振荡器产生。激光脉冲的时间间隔是 100 fs，半高半宽为 6.7 meV，重复频率为 82 MHz。通过标准的时间分辨的泵浦—探测实验装置，脉冲激光被分为强度比为 3:1 的泵浦和探测光。泵浦和探测光几乎垂直入射到样品的表面，其间经过具有 50 mm 焦距的波片聚焦到样品上 30  $\mu\text{m}$  的直径范围内。两个消色差 1/4 波片分别被插入到泵浦和探测光路中，用以产生偏振性相同或者正交的圆偏振的泵浦和探测光。微分透射率的变化用光电二极管和锁相放大器测量。激光的中心波长被调节为 830 nm，用以激发重空穴，因而初始化电子自旋极化为 100 % [514]。在实验中，右旋的泵浦光 ( $\sigma^+$ ) 激发自旋朝下极化的电子，而经过一段时间延迟的  $\sigma^+$  [左旋圆偏光 ( $\sigma^-$ )] 探测光测量自旋下 (上) 的电子。载流子的复合可以用线偏振光测量。此外，一个光衰减器被用于控制入射激光的能量，以保证电子的浓度  $N$  处在  $0.3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  到  $4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  的范围。激光激发电子的浓度利用公式  $(1 - R)E\alpha/(h\nu S)$  计算得到。这里  $R$  和  $\alpha$  分别是样品的反射率和吸收率， $E$  是每个脉冲的泵浦能量， $h\nu$  是光子能量，而  $S$  是泵浦光斑的面积大小。

### 5.2.2 实验数据

实验在室温下进行，主要结果显示在图 5-1 中。图 5-1 左图给出了四种不同激发浓度， $0.47 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ， $0.89 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ， $1.42 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  以及  $3.01 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  下探测光透射率的延迟信号。用  $(\sigma^+, \sigma^+)$  以及  $(\sigma^+, \sigma^-)$  标记的信号分别来自于泵浦光和探测光圆偏振性相同和正交配置下的测量，而用  $(-, -)$  标记的信号来自于共线的线偏振光的泵浦—探测测量，体现光激发载流子的复合过程。刚开始时， $(\sigma^+, \sigma^+)$  信号比  $(-, -)$  信号要强，而  $(\sigma^+, \sigma^-)$  信号比  $(-, -)$  信号要弱。但是最终， $(\sigma^+, \sigma^+)$  和  $(\sigma^+, \sigma^-)$  信号趋向于和  $(-, -)$  信号一致。这正体现了导带中  $|1/2\rangle$  和  $|-1/2\rangle$  自旋态间电子的弛豫 [510, 515]。 $(\sigma^+, \sigma^+)$  信号反应了由  $\sigma^+$  泵浦光直接激发的多数自旋的衰减，而  $(\sigma^+, \sigma^-)$  信号增强到与  $(-, -)$  信号一致则反应了由于自旋的弛豫少数自旋在数目上的增加。我们利用文献 [515] 中描述泵浦—探测实验的测量模型来拟合时间延迟的实验

信号，并以此得到自旋弛豫时间  $\tau$ 。空穴的自旋弛豫非常快（0.1 ps 的量级），因而对电子的弛豫没影响 [513]。图 5-1 右图给出了电子自旋弛豫时间对浓度的依赖，其中的圆点对应于量子阱中的结果。此外，作为对比，我们在体的 GaAs 中也进行了类似的实验，并将结果用空心的方框给出。可以发现，随着载流子浓度的升高，体材料中的自旋弛豫时间单调下降，和之前在  $n$  型体 GaAs 中报告的结果一致 [74, 516]。但是，在量子阱中，随着浓度增大，自旋弛豫时间先在低浓度区上升，在  $1.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  处达到约 120 ps 的最大值，然后倾向于下降。

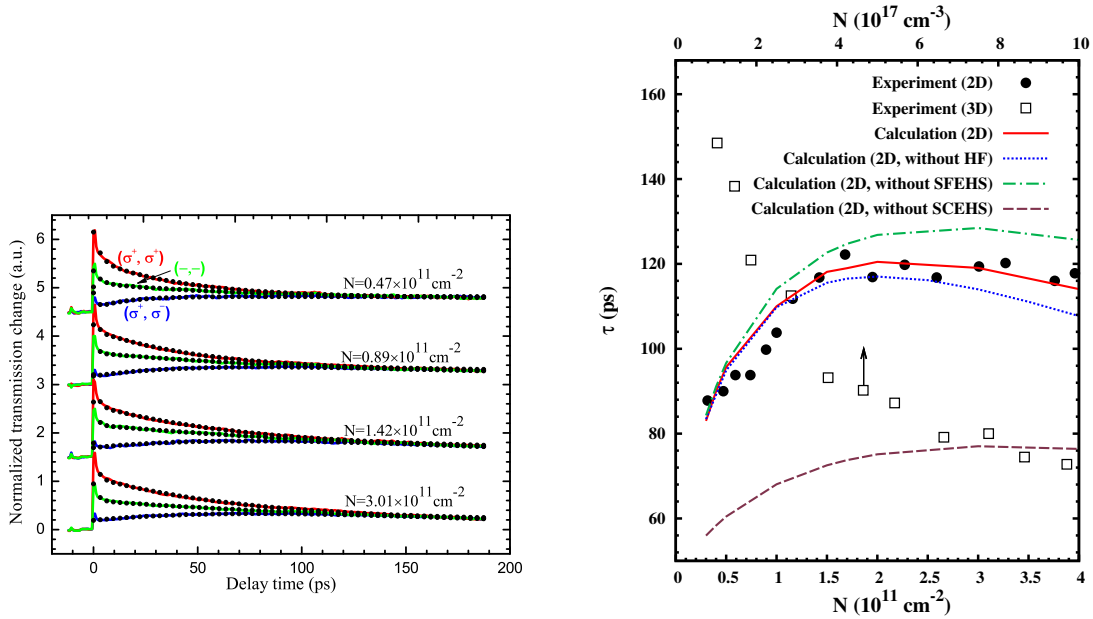


图 5-1: 左图: 四种载流子浓度下探测光的透射率随时间的演化。实线是实验数据，点是用泵浦-探测实验模型 [515] 拟合的结果。用  $(\sigma^+, \sigma^+)$  标记的曲线是相同圆偏振性的探测结果，用  $(\sigma^+, \sigma^-)$  标记的是正交圆偏振性的探测结果，用  $(-, -)$  标记的是共线的线偏振的探测结果。为清晰起见，每组数据在纵轴上都加了不同的偏移量。右图: 电子自旋弛豫时间  $\tau$  对载流子浓度  $N$  的依赖。圆点: 量子阱中的实验数据 (2D); 方框: 体中的实验数据。实线: 完全的理论计算; 链线: 没有自旋翻转散射 (SFEHS) 的理论计算; 短划线: 没有自旋守恒散射 (SCEHS) 的理论计算; 点线: 没有库仑 Hartree-Fock (HF) 项的理论计算。注意到体中的数据刻度在图的上边框。

### 5.2.3 数值结果

为了理解实验现象，我们基于动力学的自旋 Bloch 方程做了完全微观的计算 [278]。我们考虑进 DP 和 BAP 自旋弛豫机制。在散射项中我们包含了所有相关的散射，比如电子-纵向光学声子散射，电子-电子库仑散射以及电子-空穴库仑散射。在电子-空穴库仑散射中，我们包含了自旋翻转的电子-空穴散射 (spin-flip electron-hole scattering, SFEHS) 以及自旋守恒的电子-空穴散射 (spin-conserving electron-hole



scattering, SCEHS)。正是自旋翻转的电子-空穴散射提供 BAP 自旋弛豫机制。相干进动项以及散射项的具体形式可以参考文献 [278]。

通过在不同浓度下数值求解动力学的自旋 Bloch 方程，我们得到自旋弛豫时间对载流子浓度的依赖。在计算中，Dresselhaus 自旋轨道耦合的系数  $\gamma_{6c}^D$  [见方程 (2.20)] 作为一个拟合参量，取为  $10.5 \text{ meV}\cdot\text{nm}^3$  [8]。根据实验，初始的自旋极化取为 100%，温度为 300 K。图 5-1 右图中的实线来自完全的计算，和实验数据吻合很好。实验数据和理论计算体现出的自旋弛豫时间对浓度的依赖可以用下面两个竞争效应的联合作用来解释：(I) 随着载流子浓度的增大，自旋守恒的库仑散射增强（在室温下，GaAs 中的电子浓度要超过  $7.3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  才进入简并区，而空穴浓度要超过  $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  才进入简并区。因此在我们研究的范围内，整个系统处在非简并区，库仑散射随着浓度变大而加强），因而在强散射区的 DP 机制下使得自旋弛豫时间变长 [278, 281, 507]。(II) 非均匀扩展和自旋翻转散射都随着载流子浓度的变大而增强，从而加速自旋弛豫。正如文献 [507] 和 [281] 所指出的，当 Dresselhaus 自旋轨道耦合对动量的线性依赖部分主导时，效应 (I) 对浓度的依赖比效应 (II) 要强，因而自旋弛豫时间随载流子浓度的变大而增大。但是，当 Dresselhaus 自旋轨道耦合对动量的三次方部分主导时，效应 (II) 比效应 (I) 要显著，因而自旋弛豫时间随着载流子浓度的变大而减小。这正是图 5-1 右图所呈现的现象：当  $N < 1.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  时，线性的 Dresselhaus 项占主导，因而自旋弛豫时间随着浓度的变大而增大；当浓度足够高时 Dresselhaus 三次方项开始变得重要，自旋弛豫时间倾向于下降。我们还计算了没有自旋翻转的库仑散射也即没有 BAP 自旋弛豫机制的情况下自旋弛豫，结果用链线表示。通过对比实线和链线，可以发现，BAP 自旋弛豫在高的载流子浓度下重要一些。但是，自旋弛豫仍然由 DP 机制主导 [278]。我们进一步发现，自旋守恒的电子-空穴散射在 DP 机制下对自旋弛豫有显著的贡献。这个可以从去掉了自旋守恒散射的短划线看出。在这种情况下，散射强度被明显削弱，导致自旋弛豫时间变短。

最后我们考察 Hartree-Fock 项对自旋弛豫的影响。这里是本征型的两维系统，圆偏光激发的初始自旋极化可以达到 100%。但是，由于这里温度高达 300 K，系统处在非简并区，Hartree-Fock 项贡献的沿着自旋极化方向的有效磁场较弱，因而它对自旋弛豫的影响很小。这可以从没有 Hartree-Fock 项的情形（点线）和完整的情形（实线）的对比看出来。同时，我们还可以发现，Hartree-Fock 项的贡献在高浓度区变得相对重要一些，而且抑制自旋的弛豫。这和之前的理论预测和实验观察是一致的 [309]。

#### 5.2.4 小结

我们用飞秒泵浦-探测技术研究了本征型 (001) GaAs 量子阱中电子自旋弛豫对载流子浓度的依赖。在低浓度区，自旋弛豫时间对浓度的增大表现明显的上升。在浓度更大时，自旋弛豫时间开始下降。基于动力学自旋 Bloch 方程的计算给出了和实验一致的结果。这种变化趋势与 Dresselhaus 自旋轨道耦合在不同的浓度区域动量依赖的线性部

分和三次项部分的相对重要程度和非均匀扩展随浓度的变化相关。我们的研究还发现在该系统中 DP 机制占主导，BAP 机制不重要。

### 5.3 GaAs 量子阱中高电场下涉及多个能谷的电子自旋弛豫

为了自旋电子学器件的实现，对自旋进行有效的操控是非常必要的。除了磁场的直接操控，通过门电压或者应力调控自旋轨道耦合也是常用的手段 [66, 517–522]。此外，施加电场也是一种操控自旋的可行方案。在电场的驱动下，自旋轨道耦合可以导致一个有效的净磁场，引起自旋的进动 [506]。这种操控也会影响自旋的弛豫。由于半导体自旋电子学的目的是在传统的半导体电子学中结合进自旋自由度，而目前的电子学器件很多都在高电场下工作，因而研究高电场下的自旋弛豫是必要的。但是在高的电场下，电子会占据高的子带或者高的能谷，因而多子带或者多能谷的动力学需要考虑进来。文献 [507] 研究了 GaAs 量子阱中在高达 3 kV/cm 的电场下的自旋弛豫/去相位过程，多子带效应被考虑了进来。研究表明，在低温下，自旋弛豫/去相位时间随着电场的增大先变长后变短 [507]。这些现象已经被实验所验证 [508]。但是，当电场更大时，高的能谷，比如  $L$  谷，需要考虑进来。在合适的阱宽下， $L$  能谷的最低子带和  $\Gamma$  谷的次高子带比起来需要优先考虑。

不同能谷间的散射可以导致一些有趣的现象，比如由于两个能谷有效质量的不一样导致的电荷输运的耿式效应 (Gunn effect) [523]。不考虑自旋自由度的谷间散射和输运很早就已经引起人们的兴趣 [524–528]。当考虑进自旋自由度时，由于不同能谷的自旋轨道耦合、 $g$  因子、以及动量散射都不一样，因而自旋弛豫/去相位可能会有复杂的现象。通过 Schottky 势垒对体的 GaAs 的自旋注入的研究表明，在高的能谷中自旋具有较快的弛豫 [529]。最近，所谓的自旋耿式效应被从理论上提出来，用以描述半导体如 GaAs 中自旋极化的自发放大过程 [530]。但是，由于这个被预测的效应发生在高电场区，而且它发生的条件强烈依赖于自旋弛豫时间的大小，因此有必要仔细研究高场下的自旋弛豫。

在本小节中，我们研究高温下具有平面内高电场的  $n$  型 GaAs 量子阱中的自旋弛豫 [490]。 $\Gamma$  和  $L$  谷都被考虑进来。自旋弛豫来自 DP 机制 [250]。我们的研究发现，随着电场的增大，自旋弛豫时间先变长后变短。由于  $L$  能谷大的自旋轨道耦合和强的  $\Gamma$ - $L$  谷间散射， $L$  能谷扮演了总的自旋极化的“漏”的角色，并因此在高的平面内电场下有效增强整个系统的自旋弛豫。在电场驱动下，自旋轨道耦合诱导的有效磁场导致的自旋进动也被观察到。此外，由于强的  $\Gamma$ - $L$  谷间散射和  $L$  谷内强的非均匀扩展， $L$  谷的自旋具有和  $\Gamma$  谷一样的弛豫速率和进动频率。在平面内加了一个有限的磁场后，这个性质仍然保持，尽管  $L$  谷中的  $g$  因子比  $\Gamma$  谷中的大很多。温度、磁场以及杂质对自旋弛豫的影响也被研究。

## 5.3.1 模型

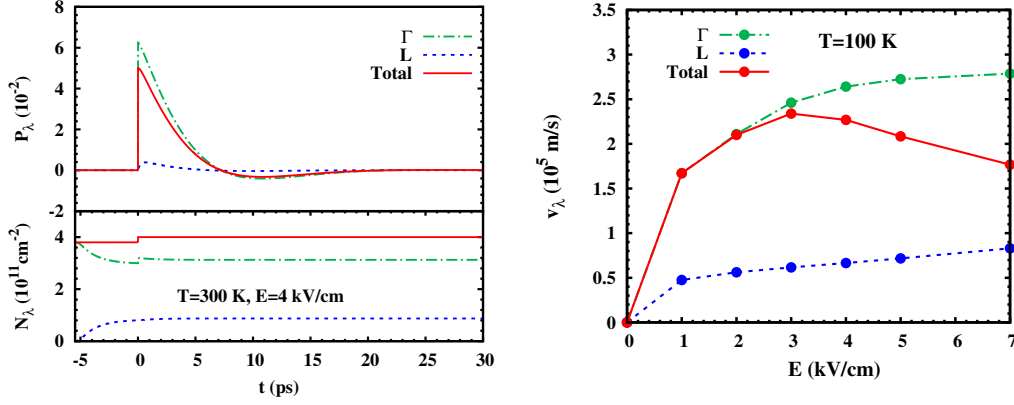


图 5-2: 左图: 在  $E = 4 \text{ kV/cm}$  的电场下初态制备过程中电子浓度  $N_\lambda$  和自旋极化  $P_\lambda$  的典型的时间演化过程。自旋极化在  $t = 0$  时刻产生。  $N_i = B = 0$ 。链线:  $\Gamma$  能谷; 短划线:  $L$  能谷; 实线: 总的电子系统。右图: 在  $T = 100 \text{ K}$  以及  $N_i = B = 0$  的情况下, 稳态的漂移速度  $v_\lambda$  随着电场  $E$  的依赖关系。链线:  $\Gamma$  谷; 短划线:  $L$  谷; 实线: 总的电子系统。

我们研究阱宽为  $a$  的  $n$  型 GaAs [001]|| $z$  量子阱。  $\Gamma$  能谷处在布里渊区的中心, 四个  $L$  谷位于  $\mathbf{K}_{L_i}^0 = (\pi/a_0)(1, \pm 1, \pm 1)$  的位置 ( $i = 1, \dots, 4$ ),  $a_0$  是晶格常数。在球对称近似下,  $\Gamma$  谷和  $L$  谷里电子的有效质量分别为  $m_\Gamma = 0.067m_0$  以及  $m_{L_i} = m_L = 0.230m_0$  [524, 531], 动能为

$$\varepsilon_{\mathbf{k}_\Gamma} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_\Gamma^2}{2m_\Gamma}, \quad (5.1)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}_{L_i}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{L_i}^2}{2m_L} + \varepsilon_{\Gamma L}. \quad (5.2)$$

这里  $\mathbf{k}_\lambda$  是三维相对动量  $\mathbf{K} - \mathbf{K}_\lambda^0$  ( $\lambda = \Gamma, L_i$ ) 在  $x$ - $y$  平面内的投影。  $\varepsilon_{\Gamma L}$  是在二维无穷深量子阱结构中  $\Gamma$ - $L$  最低子带的能量差:  $\varepsilon_{\Gamma L} = E_{\Gamma L} - \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left( \frac{1}{m_\Gamma} - \frac{1}{m_L} \right)$ , 其中  $E_{\Gamma L} = 0.28 \text{ eV}$  是体中  $\Gamma$ - $L$  谷底的能量差 [532]。在我们的研究中, 我们取阱宽为  $a = 7.5 \text{ nm}$ 。此时  $\varepsilon_{\Gamma L} = 0.21 \text{ eV}$ , 比  $\Gamma$  谷的最低的两个子带的能量差要小。同时我们还注意到当  $X$  谷的电子有效质量取球对称近似下的  $0.6m_0$  时,  $L$ - $X$  最低子带的能量差高达  $0.17 \text{ eV}$  [531]。因而在我们的研究中只需考虑  $\Gamma$  和  $L$  谷的最低子带。

系统的哈密顿量为

$$H = \sum_{\lambda} H_{\lambda}^0 + \sum_{\lambda\lambda'} H_{\lambda\lambda'}^I, \quad (5.3)$$

$$H_{\lambda\lambda'}^I = H_{\lambda\lambda'}^{e-e} + H_{\lambda\lambda'}^{e-p} + H_{\lambda\lambda'}^{e-i} \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (5.4)$$

其中

$$H_\lambda^0 = \sum_{\mathbf{k}_\lambda \sigma \sigma'} \left\{ (\varepsilon_{\mathbf{k}_\lambda} + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{R}) \delta_{\sigma \sigma'} + \left[ \frac{1}{2} g_\lambda \mu_B \mathbf{B} + \mathbf{h}_\lambda(\mathbf{k}_\lambda) \right] \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma \sigma'} \right\} C_{\mathbf{k}_\lambda \sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}_\lambda \sigma'}$$

是  $\lambda$  谷中电子的哈密顿量。 $-e$  是电子的电荷， $\mathbf{R} = (x, y)$  是电子的位置，而  $\mathbf{E}$  是外加的电场， $\mathbf{B}$  是 Voigt 构型下的外加磁场。在我们的计算中，除非特别说明， $\mathbf{E}$  和  $\mathbf{B}$  沿着  $x$  方向。 $C_{\mathbf{k}_\lambda \sigma}^\dagger$  ( $C_{\mathbf{k}_\lambda \sigma}$ ) 是具有相对动量  $\mathbf{k}_\lambda$  和自旋  $\sigma$  的电子的产生（湮灭）算符。有效  $g$  因子为  $g_\Gamma = -0.44$  [533] 和  $g_{L_i} = g_L = 1.35$  [534]。 $\mathbf{h}_\lambda(\mathbf{k})$  代表 Dresselhaus 自旋轨道耦合 [258, 535],

$$h_\Gamma(\mathbf{k}_\Gamma) = \frac{\gamma}{2} (k_{\Gamma x} (k_{\Gamma y}^2 - \langle k_{\Gamma z}^2 \rangle), k_{\Gamma y} (\langle k_{\Gamma z}^2 \rangle - k_{\Gamma x}^2), \langle k_{\Gamma z}^2 \rangle (k_{\Gamma x}^2 - k_{\Gamma y}^2)), \quad (5.5)$$

$$h_{L_i}(\mathbf{k}_{L_i}) = \text{sgn}(n_i^x n_i^y n_i^z) \beta (k_{L_i x}, k_{L_i y}, \langle k_{L_i z}^2 \rangle) \times \hat{\mathbf{n}}_i. \quad (5.6)$$

这里  $\hat{\mathbf{n}}_i$  是沿着  $L_i$  谷纵向主轴的单位矢量， $\text{sgn}$  是符号函数。 $\langle k_{\lambda z}^2 \rangle$  ( $\langle k_{\lambda z}^2 \rangle$ ) 代表算符  $-i\partial/\partial z - K_{\lambda z}^0$  [ $(-i\partial/\partial z - K_{\lambda z}^0)^2$ ] 在  $\lambda$  谷最低子带的平均值。在无限深势阱近似下， $\langle k_{\lambda z}^2 \rangle = 0$  [ $\langle k_{\lambda z}^2 \rangle = (\pi/a)^2$ ]。计算中所采用的自旋轨道耦合系数为  $\gamma = 0.011$  eV·nm<sup>3</sup> [277, 536]， $\beta = 0.026$  eV·nm [342]。相互作用哈密顿量包含谷内 ( $\lambda' = \lambda$ ) 和谷间 ( $\lambda' \neq \lambda$ ) 的库仑散射  $H_{\lambda\lambda'}^{e-e}$ 、电声散射  $H_{\lambda\lambda'}^{e-p}$  以及电子杂质散射  $H_{\lambda\lambda'}^{e-i}$ 。这些哈密顿量的表达式在文献 [262, 524, 537, 538] 中给出。

动力学自旋 Bloch 方程是描述多个能谷的密度矩阵的时间演化的方程：

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k}_\lambda} = \dot{\rho}_{\mathbf{k}_\lambda}|_{\text{dri}} + \dot{\rho}_{\mathbf{k}_\lambda}|_{\text{coh}} + \sum_{\lambda'} \dot{\rho}_{\mathbf{k}_\lambda}|_{\text{scat}, \lambda\lambda'}. \quad (5.7)$$

这里  $\dot{\rho}_{\mathbf{k}_\lambda}|_{\text{scat}, \lambda\lambda'}$  代表谷内 ( $\lambda = \lambda'$ ) 和谷间 ( $\lambda \neq \lambda'$ ) 散射项：

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k}_\lambda}|_{\text{scat}, \lambda\lambda'} = -\{S_{\lambda\lambda'}^{\mathbf{k}_\lambda}(>, <) - S_{\lambda\lambda'}^{\mathbf{k}_\lambda}(<, >) + S_{\lambda\lambda'}^{\mathbf{k}_\lambda}(>, <)^{\dagger} - S_{\lambda\lambda'}^{\mathbf{k}_\lambda}(<, >)^{\dagger}\}, \quad (5.8)$$

其中

$$\begin{aligned} S_{\lambda\lambda'}^{\mathbf{k}_\lambda}(>, <) &= \pi N_i \delta_{\lambda\lambda'} \sum_{\mathbf{q}} U_{\lambda\lambda', \mathbf{q}}^2 \rho_{\mathbf{k}_\lambda - \mathbf{q}}^> \rho_{\mathbf{k}_\lambda}^< \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_\lambda} - \varepsilon_{\mathbf{k}_\lambda - \mathbf{q}}) \\ &+ \pi \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'_{\lambda'}} V_{\lambda\lambda', \mathbf{q}}^2 \rho_{\mathbf{k}_\lambda - \mathbf{q}}^> \rho_{\mathbf{k}_\lambda}^< \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}'_{\lambda'}}^> \rho_{\mathbf{k}'_{\lambda'} - \mathbf{q}}^<] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_\lambda - \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_\lambda} + \varepsilon_{\mathbf{k}'_{\lambda'}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_{\lambda'} - \mathbf{q}}) \\ &+ \pi \sum_{\mathbf{k}'_{\lambda'}} M_{\lambda\lambda', \mathbf{q}}^2 \rho_{\mathbf{k}'_{\lambda'}}^> \rho_{\mathbf{k}_\lambda}^< [N_{\lambda\lambda'}^< \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_\lambda} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_{\lambda'}} - \Omega_{\lambda\lambda'}) + N_{\lambda\lambda'}^> \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_\lambda} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_{\lambda'}} + \Omega_{\lambda\lambda'})]. \end{aligned} \quad (5.9)$$

这里  $N_{\lambda\lambda'} = N_{\lambda'\lambda} = [\exp(\hbar\Omega_{\lambda\lambda'}/k_B T) - 1]^{-1}$  是频率为  $\Omega_{\lambda\lambda'}$  的声子的玻色分布。  $M_{\lambda\lambda',\mathbf{q}}^2$  是电声散射的矩阵元，其中  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_\lambda - \mathbf{k}'_{\lambda'} + \mathbf{k}_\lambda^0 - \mathbf{k}'_{\lambda'}^0$ 。由于我们考虑高温的情形，谷内的电子-声学声子的散射可以忽略不计。  $\Gamma$  谷内的电子-纵向光学声子 (LO) 散射和  $L$  谷内的电子-光学形变势声子散射的矩阵元分别为  $M_{\Gamma\Gamma,\mathbf{q}}^2 = \sum_{q_z} \frac{e^2 \hbar \Omega_{\Gamma\Gamma}}{2\epsilon_0(q^2 + q_z^2)} (\kappa_\infty^{-1} - \kappa_0^{-1}) |I_{\Gamma\Gamma}(iq_z)|^2$  和  $M_{L_i L_i, \mathbf{q}}^2 = \sum_{q_z} \frac{\hbar D_{L_i L_i}^2}{2d\Omega_{L_i L_i}} |I_{L_i L_i}(iq_z)|^2$  [524]。对于谷间的电子-声子散射，闪锌矿 III-V 族半导体的选择定则表明 LO 声子和纵向声学声子 (LA) 可以参与谷间的散射 [539]。但是，后来有研究进一步表明，这些选择定则在谷间散射得以发生的高能区不适用 [540-542]。因此，所有的声子支，包括横向光学声子 (TO) 以及横向声学声子 (TA)，都可以贡献谷间散射 [542]。然而，电子-TA 声子的散射很弱，可以忽略 [540, 542]。LO、TO 以及 LA 声子具有可比的能量 [541]，因而它们导致的谷间散射可以归并在一起，用平均的声子能量和总的耦合常数来描述 [542]。这里，声子动量的平面内分量  $\mathbf{q}$  主要由  $\mathbf{k}_\lambda^0 - \mathbf{k}'_{\lambda'}^0$  决定，因而平均的声子能量和总的电声耦合近似为无动量依赖的常数。对于  $\Gamma$ - $L$  的谷间电声散射，我们有  $M_{\Gamma L_i, \mathbf{q}}^2 = M_{L_i \Gamma, \mathbf{q}}^2 = \sum_{q_z} \frac{\hbar D_{\Gamma L_i}^2}{2d\Omega_{\Gamma L_i}} |I_{\Gamma L_i}(iq_z)|^2$ ，而对于  $L$ - $L$  的谷间电声散射，有  $M_{L_i L_j, \mathbf{q}}^2 = \sum_{q_z} \frac{\hbar D_{L_i L_j}^2}{2d\Omega_{L_i L_j}} |I_{L_i L_j}(iq_z)|^2$  ( $i \neq j$ )。这里  $d = 5.36 \text{ g/cm}^3$  是晶格的质量密度， $\kappa_0 = 12.9$  和  $\kappa_\infty = 10.8$  是相对的静态和低频介电常数， $\epsilon_0$  是真空介电常数。声子能量为  $\hbar\Omega_{\Gamma\Gamma} = 35.4 \text{ meV}$ 、 $\hbar\Omega_{L_i L_i} = 34.3 \text{ meV}$  [524]、 $\hbar\Omega_{\Gamma L_i} = \hbar\Omega_{L_i \Gamma} = 20.8 \text{ meV}$  [524] 以及  $\hbar\Omega_{L_i L_j} = 29.0 \text{ meV}$  [524]。形变势为  $D_{L_i L_i} = 0.3 \times 10^9 \text{ eV/cm}$  [524]、 $D_{\Gamma L_i} = 1.1 \times 10^9 \text{ eV/cm}$  [524, 542] 以及  $D_{L_i L_j} = 1.0 \times 10^9 \text{ eV/cm}$  [524, 542]。  $V_{\lambda\lambda',\mathbf{q}} = \sum_{q_z} \frac{e^2}{\epsilon_0 \kappa_0 (q^2 + q_z^2 + \kappa^2)} I_{\lambda\lambda'}(iq_z) I_{\lambda'\lambda'}^*(iq_z) = \sum_{q_z} \frac{e^2}{\epsilon_0 \kappa_0 (q^2 + q_z^2 + \kappa^2)} |I_{\lambda\lambda'}(iq_z)|^2$  是谷内 (谷间) 的库仑散射矩阵元，对应于  $\lambda = \lambda'$  ( $\lambda \neq \lambda'$ )。  $U_{\lambda\lambda',\mathbf{q}}^2 = \sum_{q_z} \{Z_i e^2 / [\epsilon_0 \kappa_0 (q^2 + q_z^2 + \kappa^2)]\}^2 |I_{\lambda\lambda'}(iq_z)|^2$  是谷内的电子-杂质散射矩阵元，杂质电荷数取为  $Z_i = 1$ 。  $N_i$  是杂质浓度。我们取 Debye 屏蔽常数  $\kappa^2 = Ne^2 / (a\epsilon_0 \kappa_0 k_B T)$ 。形状因子  $|I_{\lambda\lambda'}(iq_z)|^2 \equiv |\langle \phi_\lambda(z) | e^{iq_z z} | \phi_{\lambda'}(z) \rangle|^2 = \frac{\pi^4 \sin^2 y}{y^2 (y^2 - \pi^2)^2}$ ，其中  $y \equiv a(q_z - K_{\lambda z}^0 + K_{\lambda' z}^0) / 2$ 。

在我们的计算中， $t = 0$  时刻的初态由  $t = -t_0$  时刻无自旋极化的平衡态在电场作用下演化而来。

$$f_{\mathbf{k}_\Gamma, \sigma}(-t_0) = \{\exp[(\epsilon_{\mathbf{k}_\Gamma} - \mu) / k_B T] + 1\}^{-1}, \quad (5.10)$$

$$f_{\mathbf{k}_{L_i}, \sigma}(-t_0) = \rho_{\mathbf{k}_\Gamma, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}}(-t_0) = \rho_{\mathbf{k}_{L_i}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}}(-t_0) = 0, \quad (5.11)$$

这里  $\mu$  代表温度  $T$  下的化学势。我们在  $t = -t_0$  时刻施加电场，让系统在  $t = 0$  时刻之前演化到稳态。在电场驱动和谷间散射的作用下，部分电子从  $\Gamma$  谷转移到  $L$  谷。接着我们施加一个圆偏振的激光脉冲在  $\Gamma$  谷激发自旋向上的电子。我们假设被激发的非平衡电子在  $\Gamma$  谷费米面附近满足高斯分布： $\delta f_{\mathbf{k}_\Gamma, 1/2} = \alpha \exp[-(\epsilon_{\mathbf{k}_\Gamma} - \epsilon_F)^2 / 2\delta_\epsilon^2] [1 - f_{\mathbf{k}_\Gamma, 1/2}(0)]$ 。这里  $\alpha = NP_0 / \{\sum_{\mathbf{k}_\Gamma} \exp[-(\epsilon_{\mathbf{k}_\Gamma} - \epsilon_F)^2 / 2\delta_\epsilon^2] [1 - f_{\mathbf{k}_\Gamma, 1/2}(0)]\}$ ， $\epsilon_F$  是  $\Gamma$  谷的费米能，而  $\delta_\epsilon = \hbar / \delta_\tau$ 。  $N$  是激光激发后总的电子密度， $P_0$  是激光激发的自旋极化。我们取  $N = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  以及  $P_0 = 5\%$ 。

### 5.3.2 数值结果

首先我们考察电场和激光脉冲下初态制备过程中电子浓度和自旋极化的时间演化（图 5-2 左图给出了一种典型的情况）。电场在  $t = -t_0 = -5.5$  ps 时刻施加，而激光脉冲在  $t = 0$  时刻应用。 $P_\lambda(t) \equiv 2 \sum_{\mathbf{k}_{\lambda\sigma}} [\sigma f_{\mathbf{k}_{\lambda,\sigma}}(t)] / \sum_{\mathbf{k}_{\lambda\sigma}} f_{\mathbf{k}_{\lambda,\sigma}}(t)$  以及  $N_\lambda(t) \equiv \sum_{\mathbf{k}_{\lambda\sigma}} f_{\mathbf{k}_{\lambda,\sigma}}(t)$  分别是  $\lambda$  谷中的自旋极化和电子浓度。 $\lambda$  谷稳态的漂移速度  $\mathbf{v}_\lambda$  可以从  $\mathbf{v}_\lambda(t) \equiv \sum_{\mathbf{k}_{\lambda\sigma}} [f_{\mathbf{k}_{\lambda,\sigma}}(t) \hbar \mathbf{k}_\lambda / m_\lambda] / \sum_{\mathbf{k}_{\lambda\sigma}} f_{\mathbf{k}_{\lambda,\sigma}}(t)$  的稳态值得到。在图 5-2 右图中，我们给出了稳态下各个能谷的漂移速率  $v_\lambda$  以及总的漂移速度对电场的依赖。漂移速率对电场的依赖明显的体现出了负的微分电导，也即电荷的耿式效应 [523]。

热电子温度  $T_e$  可以通过拟合各个能谷里稳态电子分布的 Boltzmann 型的尾巴得到 [506]。结果表明  $\Gamma$  和  $L$  谷有独立的热电子温度。此外， $\Gamma$  谷有两个特征温度。一个温度出现在和  $L$  谷能量重叠的区域。由于强的  $\Gamma$ - $L$  谷间散射， $\Gamma$  和  $L$  谷中在这个区域的电子具有相同的热电子温度（标记为  $T_L$ ）。另一个温度描述  $\Gamma$  谷的低能电子。它是  $\Gamma$  谷的典型热电子温度，而且比  $T_L$  高。在图 5-3 左图中，我们给出了在不同的晶格温度下， $T_\Gamma$  和  $T_L$  随着电场的依赖关系。可以看见，具有小的有效质量（ $\Gamma$  谷的电子）和低的晶格温度（因而相对弱的散射）的电子更容易被电场热化。

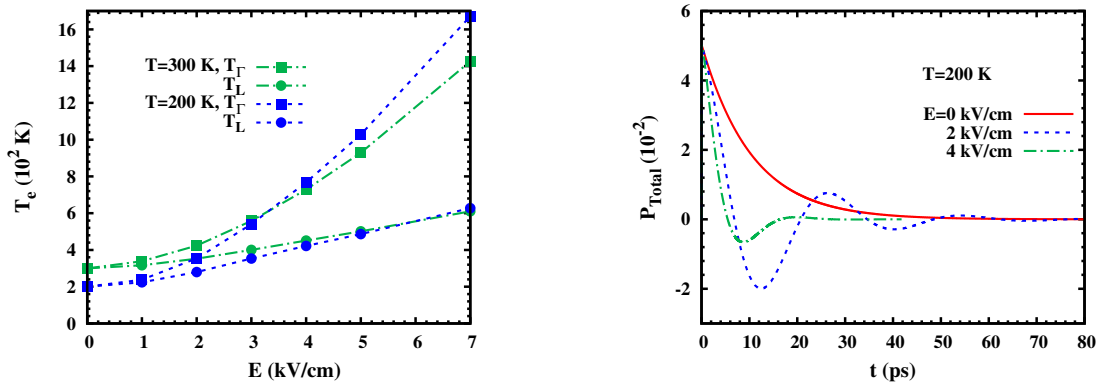


图 5-3: 左图: 在不同的晶格温度  $T = 300$  K (链线) 和  $200$  K (短划线) 下, 热电子温度  $T_\Gamma$  (带框的线) 和  $T_L$  (带圈的线) 随着电场的依赖。 $N_i = B = 0$ 。右图: 在不同电场  $E = 0$  (实线),  $2$  (短划线), 以及  $4$  kV/cm (链线) 下自旋极化  $P_{\text{Total}}$  随着时间的演化。各种情况下给出自旋弛豫时间分别为  $10.5$ ,  $14.4$ , 以及  $4.7$  ps。 $N_i = B = 0$ 。

自旋弛豫时间  $\tau$  可以由自旋极化  $P_\lambda$  的时间演化得到。由于各个能谷只考虑了最低子带，而且在电场下存在“逃逸”效应 [543]，我们的研究被限制在低于  $7$  kV/cm 的电场范围。

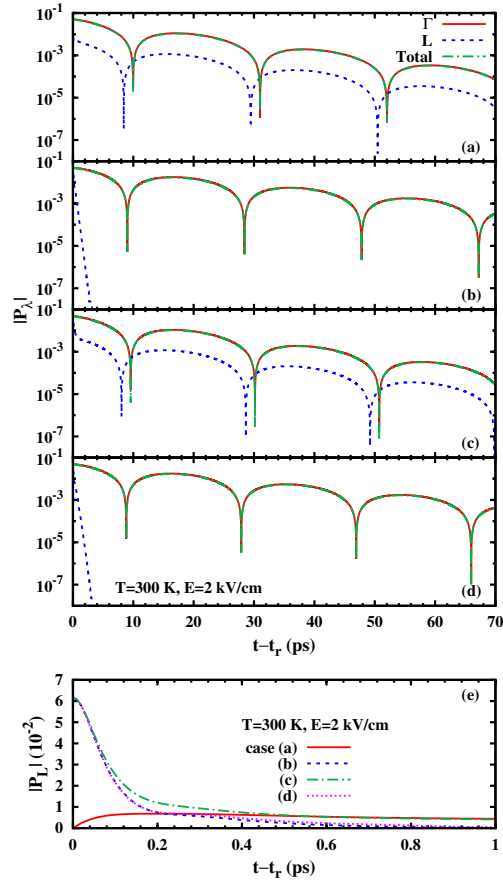


图 5-4: 在电场  $E = 2$  kV/cm 下, 自旋极化  $|P_\lambda|$  对时间  $t - t_r$  的依赖关系。实线:  $\Gamma$  谷; 短划线:  $L$  谷; 链线: 整个电子系统。(a): 具有  $\Gamma$ - $L$  谷间电声散射和谷间库仑散射; (b): 没有  $\Gamma$ - $L$  谷间电声散射; (c): 没有  $\Gamma$ - $L$  谷间库仑散射; 以及 (d): 没有  $\Gamma$ - $L$  谷间的任何散射。  $T = 300$  K 以及  $N_i = B = 0$ 。(e):  $L$  谷中自旋极化在初始时间段内的演化。

### 5.3.2.1 自旋极化的时间演化

在图 5-3 右图中, 我们首先展示了在不同电场下总的自旋极化  $P_{\text{Total}}(t) \equiv \sum_\lambda P_\lambda(t)$  随时间的演化。  $T = 200$  K 以及  $B = N_i = 0$ 。从图中可以看见, 在电场下, 总的自旋极化会进动, 且进动周期显示出对  $E$  的依赖。这是因为电场驱动产生的质心动量通过 Dresselhaus 自旋轨道耦合诱导有效的净磁场 [506]。另一个有趣的现象是, 随着电场的增大, 自旋弛豫时间先上升然后下降。实际上, 对应于图中  $E = 0$ 、 $2$ 、 $4$  kV/cm 的电场, 自旋弛豫时间分别为 10.5、14.4 以及 4.7 ps。在上一小节中我们已经提到电场可以导致两个效应: 热电子效应和质心漂移效应 [506]。质心漂移通过自旋轨道耦合诱导有效磁场混合  $\Gamma$  谷中面内和面外的自旋弛豫 [324, 503], 使得沿着  $z$  方向的自旋弛豫时间在小电场下比零电场下的长。另外, 这两个效应一方面增强散射, 另一方面增强非均匀扩展。在小电场区,  $\Gamma$  谷的线性 Dresselhaus 项占主导时, 前一个效

应占主导，在强散射极限使得自旋弛豫时间随电场变长 [277, 281, 506]。但是，当电场足够大时，电子占据高能态，除了  $\Gamma$  谷 Dresselhaus 项的三次方部分导致的非均匀扩展变强的效应变得重要外 [506]， $L$  谷也开始扮演一个重要的角色。这是因为随着电场的增大， $L$  谷中的电子数目增多，谷间的散射变得更重要。 $L$  谷中强的自旋轨道耦合连同谷间散射，会导致高电场下自旋弛豫时间随电场的增大而下降。下面我们具体研究  $L$  谷以及谷间散射对整个系统自旋弛豫的影响。

### 5.3.2.2 谷间散射对自旋弛豫的影响

为了弄清楚谷间散射对自旋弛豫的影响，我们比较在具有不同的  $\Gamma$ - $L$  谷间散射情况下计算得到的结果。我们考虑了如下四种情形。(a): 具有谷间电声散射和谷间库仑散射；(b): 没有谷间电声散射；(c): 没有谷间库仑散射；以及 (d): 没有任何谷间散射。为了获得  $L$  谷中自旋弛豫的清晰图像，我们需要在  $L$  谷准备足够大的电子浓度以及自旋极化。为了实现这一点，我们首先在  $t = 0$  时刻关掉系统的自旋相干进动项，让多能谷系统在电场下达到自旋极化的稳态（典型的，在  $T = 300$  K,  $E = 2$  kV/cm 以及  $B = N_i = 0$  的条件下，在施加圆偏振的激光脉冲后，系统达到自旋极化的稳态所需要的时间  $t_r$  在 6 ps 左右）。需要注意的是，在这个阶段，所有的谷间散射都应该包含进来，以便  $\Gamma$  谷的电子能够进入到  $L$  谷。接着在达到稳态后的  $t_r$  时刻，我们打开自旋相干进动项，允许自旋弛豫，同时按前面四种情形的需要关掉相应的  $\Gamma$ - $L$  谷间散射。需要注意的是，在完整的计算中 [比如对于情形 (a)]，自旋相干进动项和所有的散射项都一直存在。

在图 5-4 中，我们给出了从自旋弛豫开始发生， $|P_\lambda|$  随着  $t - t_r$  的变化。对于情形 (a)， $t_r$  取为 0。在计算中， $T = 300$  K,  $E = 2$  kV/cm 以及  $B = N_i = 0$ 。从图 5-4(a)，我们可以看见，在真实的情形下， $\Gamma$  和  $L$  谷的自旋极化具有相同的衰减率和进动周期，尽管  $L$  谷的初始自旋极化非常小。但是，当谷间电声散射去掉后 [图 5-4(b) 和 (d)]， $\Gamma$  和  $L$  谷的自旋弛豫显示出巨大的不同：一方面，不管谷间库仑散射存在 [图 5-4(b)] 还是不存在 [图 5-4(d)]， $L$  谷中的自旋弛豫都比  $\Gamma$  谷中的快，即使此时由于前面我们提到的数值计算上的一些控制技巧使得  $L$  谷的初始自旋极化增大了 [从图 5-4(e) 中可以看见， $P_L(0)$  甚至可以高过 5%]；另一方面， $L$  谷中没有自旋的进动。在图 5-4(c) 中，谷间的电声散射得以保留，而谷间的库仑散射被关掉，这时  $L$  谷中的自旋具有与  $\Gamma$  谷自旋一样的衰减速率和进动周期。以上这些现象都表明  $\Gamma$ - $L$  谷间的电声散射是主导的谷间散射。

上面的现象可以基于不同能谷有不同的自旋轨道耦合以及谷间存在强的电声散射这一事实来理解。从线性项来看， $L$  谷中的自旋轨道耦合强度是  $\Gamma$  谷中的 10 多倍。这个强的自旋轨道耦合产生的非均匀扩展会导致独立的  $L$  谷中快的自旋弛豫 [图 5-4(d) 中的短划线，弛豫时间在 0.1 ps 的量级]。这个  $L$  谷中快的自旋弛豫也在打开自旋相干进动项后初始阶段内极快的自旋弛豫过程中体现出来 [图 5-4(e) 中的 (b)-(d) 情形]。 $L$  谷中极快的自旋弛豫，以及  $\Gamma$ - $L$  谷间电声散射导致的有效的跨谷电子交换，



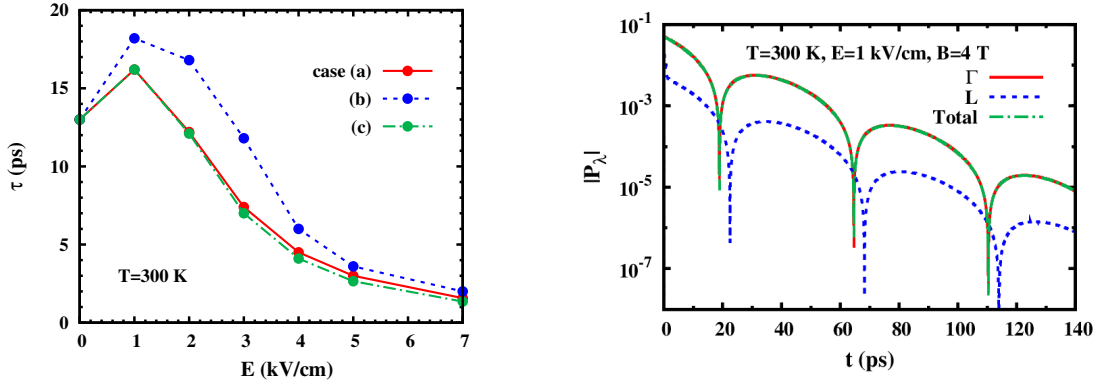


图 5-5: 左图: 自旋弛豫时间  $\tau$  对电场  $E$  的依赖。实线: 具有  $\Gamma$ - $L$  谷间电声散射和谷间库仑散射[对应正文中的情形 (a)]; 短划线: 没有  $\Gamma$ - $L$  谷间电声散射 [对应正文中的情形 (b)]; 链线: 没有  $\Gamma$ - $L$  谷间库仑散射 [对应正文中的情形 (c)]。  $T = 300$  K 以及  $N_i = B = 0$ 。右图: 电场  $E = 1$  kV/cm 以及磁场  $B = 4$  T 下自旋极化  $|P_\lambda|$  的时间演化。

使得  $L$  谷扮演了自旋极化“漏”的角色, 有效地加速整个系统的自旋弛豫 [比较图 5-4 中 (a) 和 (b) 情形下的链线]。此外, 强的谷间电声散射同时也使得不同能谷的自旋极化的演化变得相同。

为了对不同电场下谷间散射对自旋弛豫的影响有更深入的了解, 对于情形 (a)-(c), 在图 5-5 左图中, 我们给出了自旋弛豫时间  $\tau$  对电场  $E$  的依赖。在这个图中, 由于  $L$  谷经由谷间电声散射导致的整个系统的自旋弛豫的增强, 可以从实线和短划线的对比中看出来。谷间库仑散射的影响在  $E$  比较高 ( $> 2$  kV/cm) 时可以显现出来, 它在强散射区导致自旋弛豫时间微弱的变长。

### 5.3.2.3 自旋的进动

现在我们考察自旋进动的性质。我们已经知道, 在电场存在的情况下, 自旋可以在电场诱导的净磁场下进动 [506]。当额外施加一个静磁场时, 自旋绕着合磁场进动。我们定义总的有效磁场项为  $\Omega(\mathbf{B}) = \Omega_0 + \frac{1}{2}g^*\mu_B\mathbf{B}$ 。这里  $\Omega_0$  是电场诱导的净磁场项。  $g^*$  是有效的  $g$  因子。自旋绕着  $\Omega(\mathbf{B})$  的进动频率为  $\omega_p \equiv 2|\Omega(\mathbf{B})|/\hbar$ 。对于每一个能谷,

$$\Omega_0^\lambda = \frac{\int d\mathbf{k}_\lambda (f_{\mathbf{k}_\lambda, \frac{1}{2}} - f_{\mathbf{k}_\lambda, -\frac{1}{2}}) \mathbf{h}_\lambda(\mathbf{k}_\lambda)}{\int d\mathbf{k}_\lambda (f_{\mathbf{k}_\lambda, \frac{1}{2}} - f_{\mathbf{k}_\lambda, -\frac{1}{2}})} \quad (5.12)$$

从方程 (5.5) 和 (5.6), 我们发现, 当电场沿着  $x$  方向时, 对于  $\Gamma$  谷,  $\Omega_0^\Gamma$  也沿着  $x$  方向 [注意到由于  $z$  方向强的约束,  $\langle k_{\Gamma z}^2 \rangle$  比  $k_{\Gamma y}^2$  的平均值大], 而对于  $L$  谷,  $\{\Omega_0^{L_i}\}$  有相同的大小, 但是沿着  $(0, \pm 1, \pm 1)$  四个不同的方向。因此, 在四个  $L$  能谷中, 在电场下没有净的磁场, 也即,  $\sum_i \Omega_0^{L_i} = 0$ , 而整个系统的有效磁场  $\Omega_0$  来自  $\Omega_0^\Gamma$ 。一个直接的推论是, 仅仅在电场下, 四个  $L$  谷中的电子的总的自旋极化不会显示出进动。但是,

如图 5-4(a) 所示, 由于强的  $\Gamma$ - $L$  谷间散射, 电场下  $L$  谷中的自旋进动被观察到而且具有和  $\Gamma$  谷一样的频率。我们或许还会期望在额外施加一个静磁场后,  $L$  能谷的电子自旋进动会与  $\Gamma$  谷有所不同, 因为  $L$  谷的有效  $g$  因子比  $\Gamma$  谷的大两倍左右。然而, 计算却表明, 即使在外加 4 T 的磁场下,  $L$  谷仍旧和  $\Gamma$  谷具有同样的进动频率。造成以上这些现象的原因是, 由于  $L$  谷中快的自旋弛豫、以及  $\Gamma$  与  $L$  谷之间非常有效的电子交换,  $L$  谷的电子体现出由  $\Gamma$  谷转移过来的电子的自旋进动性质, 正如图 5-5 右图所显示的那样。因此, 整个系统的自旋进动由  $\Gamma$  谷支配。事实上, 由  $g_L\mu_B B/2$  所决定的特征自旋进动时间为 13.2 ps, 而  $L$ - $\Gamma$  谷间的电声散射时间在 300 K 下约为 0.4 ps, 同时  $L$  谷内的自旋弛豫时间又在 0.1 ps 的量级。因此,  $L$  谷的自旋极化确实是通过谷间散射由  $\Gamma$  谷的自旋极化“泵浦”而来。

#### 5.3.2.4 温度、磁场以及杂质对自旋弛豫的影响

最后我们研究温度、磁场和杂质对自旋弛豫的影响。图 5-6 给出了不同温度  $T = 300$ 、200 和 100 K 下有和没有磁场/杂质的情况下自旋弛豫时间  $\tau$  对电场  $E$  的依赖。从图中, 我们可以看出, 对于每一种情形, 随着温度的降低,  $\tau$ - $E$  曲线中的峰更明显, 而且出现在相对大的电场位置。这是由三个因素导致的: 首先, 在低温下电子热化效应更显著 [506]。其次, 温度低时, 需要在更高的电场下  $\Gamma$  谷的 Dresselhaus 三次方项导致的非均匀扩展加强的效应才显著。再次, 当温度低时, 在低电场区, 由于  $L$  谷中低的电子占据 [图 5-6(a) 的插图],  $\Gamma$ - $L$  谷间电子交换变得微弱, 因此只有当电场足够大时,  $L$  谷对自旋弛豫的加强效应才变得有效。此外, 该图还表明, 在低电场区 ( $E \leq 2$  kV/cm), 自旋弛豫可以通过升高温度、加磁场或者杂质来压制。升高温度以及加杂质对自旋弛豫的压制可以由强散射极限下散射增强对非均匀扩展的抑制效应来理解。而加了磁场后,  $\Gamma$  谷的面内和面外的自旋弛豫发生混合, 使得自旋弛豫时间变长。最后从图中还可以看到, 当电场足够大的时候, 晶格温度、杂质浓度以及磁场对自旋弛豫的影响变得很微弱。在这个区域, 由于热化效应, 电声散射被大大增强, 对背景温度不再敏感, 同时杂质散射的贡献也变得相对不重要。此外, 电场通过自旋轨道耦合诱导的净磁场也能够充分混合各个方向的弛豫, 外加静磁场的效应不再明显。

### 5.3.3 小结

在这一小节中, 我们研究了高温 ( $\geq 100$  K) 下的  $n$  型 (001) GaAs 量子阱中,  $\Gamma$ - $L$  多谷系统在高电场下的自旋弛豫。我们发现, 在电场下,  $\Gamma$  谷具有两个不同的热电子温度, 分别处在不同的能量区域。其中一个热电子温度描述和  $L$  谷能量重叠区域的电子, 而且在这个温度也是  $L$  谷的热电子温度 ( $T_L$ )。另一个温度则描述  $\Gamma$  谷中低能区的热电子 ( $T_\Gamma$ )。两个温度满足  $T_\Gamma > T_L$ 。在能量重叠区域,  $\Gamma$  和  $L$  谷的热电子温度相同, 是因为强的谷间电声散射造成的。而  $T_\Gamma > T_L$  则是由于  $L$  谷中电子的有效质量大造成的。

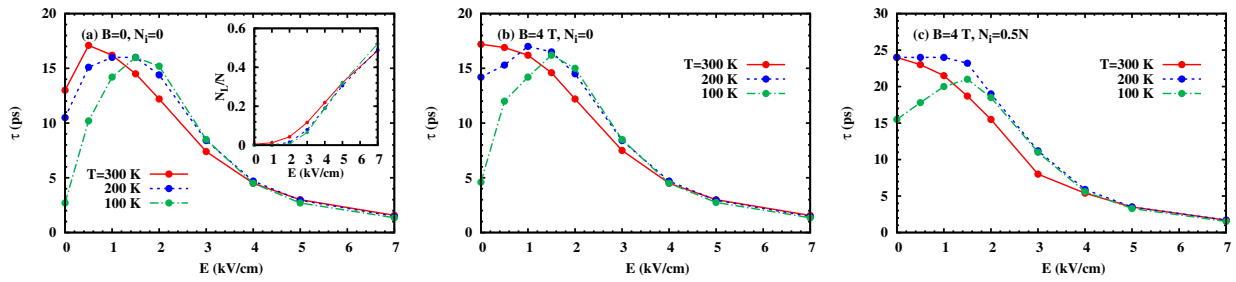


图 5-6: 不同条件下自旋弛豫时间  $\tau$  对电场  $E$  的依赖。(a)  $B = N_i = 0$ ; (b)  $B = 4 \text{ T}$ ,  $N_i = 0$ ; 以及 (c)  $B = 4 \text{ T}$ ,  $N_i = 0.5N$ 。实线、短划线和链线分别对应温度  $T = 300$ 、 $200$  和  $100 \text{ K}$ 。(a) 中的插图;  $L$  谷中所占电子的比例对电场的依赖。

我们还发现，自旋弛豫时间随着电场的增大先变大后变小，低温下该现象尤其明显。在低电场区， $\tau$  的上升是由于散射增强造成的。而在高电场区  $\tau$  的下降则是由于两个方面的原因造成的。一方面是非均匀扩展的增强，另一方面是  $L$  谷中快的自旋弛豫和强的  $\Gamma$ - $L$  谷间电声散射。事实上， $L$  谷扮演着一个自旋极化“漏”的角色。此外，同样由于  $L$  谷中快的自旋弛豫和强的  $\Gamma$ - $L$  谷间电声散射，整个电子系统的自旋进动性质由  $\Gamma$  谷支配，即使施加了外磁场也同样如此，哪怕两个谷中的有效  $g$  因子相差很大。我们也研究了温度、磁场和杂质对自旋弛豫的影响。当电场不大时，自旋弛豫可以通过升高晶格温度、加磁场或者增加杂质来压制。

最后我们讨论下文献 [530] 中所提出的“自旋耿式效应”的可能性。首先，文献 [530] 中所用的漂移扩散模型仅仅在没有自旋翻转的情况下成立。在闪锌矿半导体中，Dresselhaus/Rashba 自旋轨道耦合会造成自旋的翻转，更别说电场还能诱导有效的净磁场了。其次，我们的研究表明，在高的电场区域，自旋弛豫时间随电场增大显著下降。因此，由于这个短的自旋弛豫时间，文献 [530] 中所提出的“自旋耿式效应”所要求的条件也很难满足。

## 5.4 非对称的 (001) Si/SiGe 和 Ge/SiGe 量子阱中空穴的自旋弛豫

在这一节里我们的研究对象从电子系统转移到空穴系统。我们研究沿 (001) 方向生长的具有应力的非对称的 Si/Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> 和 Ge/Si<sub>0.3</sub>Ge<sub>0.7</sub> 量子阱中空穴的自旋弛豫 [301]。我们首先从六带的 Luttinger  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  模型出发，利用子带  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量的 Löwdin 块对角化方法，得到最低空穴子带的有效哈密顿量，包括 Rashba 自旋轨道耦合（在章节 2.1.4 中给出）。我们然后基于这个有效哈密顿量，运用动力学自旋 Bloch 方程方法，研究空穴的自旋弛豫。在我们所考察的范围内，对于 Si/SiGe (Ge/SiGe) 量子阱，空穴的自旋弛豫时间为 1~100 ps (0.1~10 ps)。我们发现空穴-声子散射很弱，从而使

得空穴-空穴的库仑散射很重要。在 Si/SiGe 量子阱中，空穴系统处在强散射区域。而在 Ge/SiGe 量子阱中，随着温度或者电子浓度的变化，空穴可以处在或弱或强的散射区域。在两种量子阱中，在低杂质浓度（或者无杂质）的情况下，自旋弛豫时间对温度和浓度的依赖都在从简并区到非简并区的转折点处出现一个峰。这个峰是由库仑散射造成的。但是，在 Ge/SiGe 量子阱中，库仑散射不仅导致一个峰，还导致一个谷。这个谷是由从弱到强的散射的过渡导致的。

### 5.4.1 模型

我们所考察的  $p$  型  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$  ( $\text{SiO}_2/\text{Ge}/\text{Si}_{0.3}\text{Ge}_{0.7}$ ) 量子阱的结构如图 5-7 左图所示。中间的 Si (Ge) 层的厚度  $\geq 10$  nm。SiO<sub>2</sub> 层被视为无穷高势垒。由于大的门电压（导致  $\geq 50$  kV/cm 的电场）和大的阱宽，价带带边在 Si/Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> (Ge/Si<sub>0.3</sub>Ge<sub>0.7</sub>) 界面处的非连续 [ $\approx 55$  meV ( $\approx 200$  meV) [355]] 可以忽略，因此可以采用三角势近似 [329, 354, 356]。在该近似下阱宽变得无关紧要。

我们从六带的 Luttinger  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  模型出发，利用子带  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量的 Löwdin 块对角化方法得到最低空穴子带的有效哈密顿量 (2.34)。在章节 2.1.4 中我们已经给出具体的过程和形式。这里我们从该有效哈密顿量出发，研究空穴的自旋弛豫。

根据方程 (2.35) 和 (2.43)，在所研究的整个电场范围内，Si/SiGe 量子阱中的最低轻空穴子带 (LH0) 的有效质量约为  $m^l = 0.27m_0$ ，而 Ge/SiGe 量子阱中的最低重空穴子带 (HH0) 的有效质量约为  $m^h = 0.057m_0$ 。在图 5-7 右图 (a) 中，我们画出了不同电场下 Si/SiGe 量子阱中四个子带（第一和第二轻空穴带 LH0 以及 LH1，第一重空穴带 HH0，以及第一自旋劈裂带 SO0）在  $\Gamma$  点的能级位置随电场的依赖。在图 5-7 右图 (b) 中，我们画出了 Si/SiGe 量子阱中 LH0 带的自旋轨道耦合系数 ( $\Xi$ 、 $\Pi$  和  $\Theta$ ，见章节 2.1.4) 以及 Ge/SiGe 量子阱中 HH0 子带的自旋轨道耦合系数 ( $\Lambda$ ) 随电场的依赖。如图 5-7 右图 (a) 所示，在电场  $E \approx 360$  kV/cm 处，LH1 和 HH0 子带出现交叉，而在  $E \approx 500$  kV/cm 处，LH1 和 SO0 子带出现反交叉。注意到尽管在图 5-7 右图中，我们的计算达到了无穷小电场的极限，但是只有在大电场区（比如，对于  $\sim 10$  nm 左右的阱宽， $E \geq 50$  kV/cm），我们的计算结果才是适用的。这是因为我们的模型忽略了 Si/SiGe (Ge/SiGe) 界面处的价带非连续性，而这种近似在小电场区会失效。在上面的这些计算中，需要用到的一些材料参数给在表 5-1 中。

### 5.4.2 数值结果

我们应用动力学的自旋 Bloch 方程研究空穴的自旋弛豫。在散射项中包括空穴-形变光学/声学声子散射 [544]，空穴-杂质和空穴-空穴库仑散射。散射项的具体表达式参考文献 [506]。这里给出空穴-声子散射的矩阵元。空穴-形变声学声子散射和空穴-形变光学声子散射的矩阵元分别为  $|M_{ac,\mathbf{Q}}|^2 = \frac{\hbar D_{ac}^2 Q}{2dv_s} |I(iq_z)|^2$  和  $|M_{op,\mathbf{Q}}|^2 =$

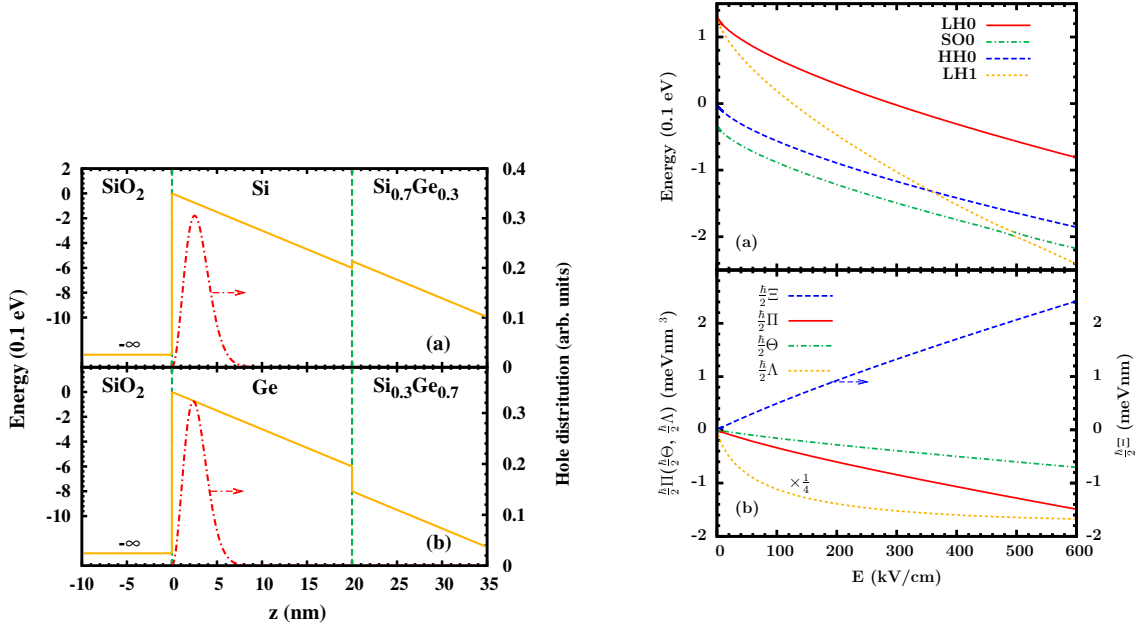


图 5-7: 左图: (a) SiO<sub>2</sub>/Si/Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> 和 (b) SiO<sub>2</sub>/Ge/Si<sub>0.3</sub>Ge<sub>0.7</sub> 量子阱的结构示意图。其中的两条竖线代表界面。实线代表电场  $E = 300$  kV/cm 下的约束势  $V(z)$ 。在三角势近似下, 价带带边在 Si/Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> 和 Ge/Si<sub>0.3</sub>Ge<sub>0.7</sub> 界面处的非连续被忽略。刻度在右边的链线分别是 (a)  $|\Psi_{1l0}(z)|^2$  以及 (b)  $|\Psi_{1h0}(z)|^2$ , 它们代表 Si/Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> 量子阱中最低的轻空穴概率分布和 Ge/Si<sub>0.3</sub>Ge<sub>0.7</sub> 量子阱中最低的重空穴概率分布。右图: (a)  $\Gamma$  点处, Si/SiGe 量子阱中最低四个空穴子带 [ 第一 (第二) 轻空穴子带 LHO (LH1), 第一重空穴带 HH0, 以及第一自旋劈裂带 SO0 ] 的能级随着电场的依赖。(b) Si/SiGe 量子阱中的 LHO 子带的自旋轨道耦合系数 ( $\frac{\hbar}{2}\Xi$ ,  $\frac{\hbar}{2}\Pi$  和  $\frac{\hbar}{2}\Theta$ ) 和 Ge/SiGe 量子阱中的 HH0 子带的自旋轨道耦合系数 ( $\frac{\hbar}{2}\Lambda$ ) 对电场的依赖。 $\frac{\hbar}{2}\Xi$  的标度在图的右边。

$\frac{\hbar\Delta_{op}^2}{2d\omega_{op}} |I(iq_z)|^2$ 。这里  $\mathbf{Q} = (\mathbf{q}, q_z)$  是声子的动量。Si 和 Ge 中的质量密度  $d$ , 形变势参数  $D_{ac}$  和  $\Delta_{op}$ , 以及光学声子能量  $\hbar\omega_{op}$  以及声速  $v_s$  给在表 5-1 中。对于 Si/SiGe 量子阱,  $I(iq_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{1l0}^\dagger(z) e^{iq_z z} \Psi_{1l0}(z) dz = \langle \chi_0^{(l1)}(z) | e^{iq_z z} | \chi_0^{(l1)}(z) \rangle + \langle \chi_0^{(l2)}(z) | e^{iq_z z} | \chi_0^{(l2)}(z) \rangle$ , 而对 Ge/SiGe 量子阱,  $I(iq_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{1h0}^\dagger(z) e^{iq_z z} \Psi_{1h0}(z) dz = \langle \chi_0^{(h)}(z) | e^{iq_z z} | \chi_0^{(h)}(z) \rangle$ 。在计算中, 空穴的初始自旋极化取为 5%。通过数值求解动力学自旋 Bloch 方程, 我们得到自旋极化随着时间的演化并进而得到自旋弛豫时间。

#### 5.4.2.1 Si/SiGe 量子阱中的空穴自旋弛豫

我们首先研究 Si/Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> 量子阱中的最低空穴带的自旋弛豫。除非特别说明, 电场  $E = 300$  kV/cm。LHO 空穴在  $z$  方向的概率分布如图 5-7(a) 中的链线所示。自旋轨道耦合系数分别为  $\frac{\hbar}{2}\Xi = 1.33$  meV nm,  $\frac{\hbar}{2}\Pi = -0.83$  meV nm<sup>3</sup>,  $\frac{\hbar}{2}\Theta = -0.39$  meV nm<sup>3</sup> [见图 5-7 右图 (b)]。此外, 由于 Si 中非常小的材料参数  $B$  (也

表 5-1: Si 和 Ge 的材料参数。质量密度  $d$ , 形变势  $D_{ac}$  和  $\Delta_{op}$ , 以及光学声子能量  $\hbar\omega_{op}$  和声速  $v_s$  来自文献 [544]。Luttinger 参数  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  和  $\gamma_3$  来自文献 [354]。

Material	$d$ (g/cm <sup>3</sup> )	$D_{ac}$ (eV)	$\Delta_{op}$ (10 <sup>8</sup> eV/cm)	$\hbar\omega_{op}$ (eV)	$v_s$ (10 <sup>5</sup> cm/s)
Si	2.33	5.03	8.7	0.063	9.0
Ge	5.32	3.5	7.0	0.037	5.4
	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\gamma_3$		
Si	4.285	0.339	1.446		
Ge	13.38	4.24	5.69		

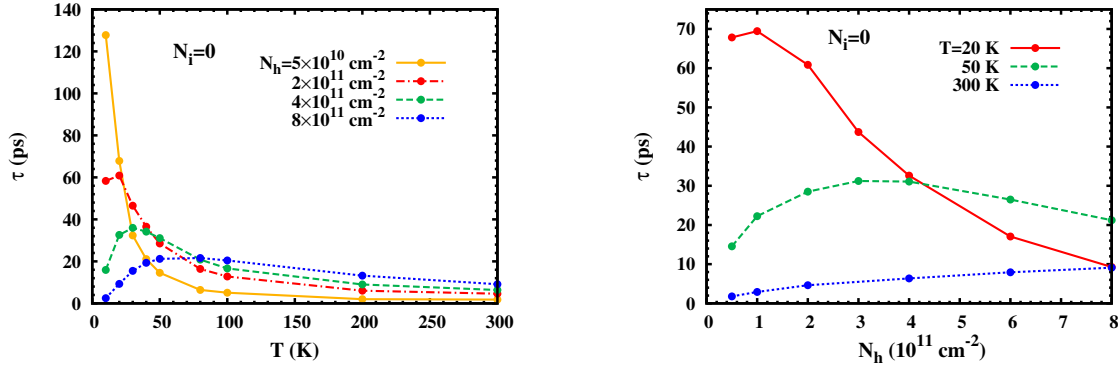


图 5-8: 左图: Si/SiGe 量子阱中不同空穴浓度下自旋弛豫时间  $\tau$  对温度  $T$  的依赖。右图: Si/SiGe 量子阱中不同温度下自旋弛豫时间  $\tau$  对空穴浓度  $N_h$  的依赖。两图中杂质浓度  $N_i = 0$ , 电场强度  $E = 300$  kV/cm。

即  $\gamma_2$ ) [见章节 2.1.4], Si/SiGe 量子阱中 Rashba 项的线性部分变得相对重要。在图 5-8 和 5-9 中, 我们展示了自旋弛豫对于温度、空穴/杂质浓度以及散射的依赖。

图 5-8 左图给出了不同空穴浓度下自旋弛豫对温度的依赖。杂质浓度取为 0。结果显示, 在空穴浓度不是特别低的情况下, 在费米温度  $T_f^h \equiv E_f^h/k_B$  ( $E_f^h$  是费米能。在空穴浓度  $N_h = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  时,  $T_f^h \approx 35$  K) 附近, 自旋弛豫时间出现一个峰。但是, 在空穴浓度特别低的情况 ( $N_h = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ) 下, 这个峰消失。这种峰最早由 Zhou 等人在高迁移率的  $n$  型 (001) GaAs 量子阱中电子自旋弛豫对温度的依赖中预测, 之后由 Ruan 等人从实验上在  $T_f^e/2$  处观察到 [294]。类似的自旋弛豫对温度依赖的峰在本征的体 GaAs [出现在  $(T_f^e/4, T_f^e/2)$  温度范围] [300], 无杂质的  $p$  型 (001) GaAs 量子阱 (在  $T_f^h$  附近) [322], 无杂质的  $n$  型 (111) GaAs 量子阱 [出现在  $(T_f^e/2, T_f^e)$  温度范围] [306] 都被预言过。这个峰是在 DP 机制下的强散射区, 库仑散射强度对温度的非单调依赖产生的。我们知道, 对于二维 (三维) 系统, 在简并区库仑散射率对温度有  $T^2$  依赖, 而在非简并区库仑散射率对温度有  $T^{-1}$  ( $T^{-3/2}$ )

依赖 [545, 546]。因而随着  $T$  的升高, 占主导作用的库仑散射先导致自旋弛豫时间的上升, 然后导致其下降。同时, 随着温度的升高, 非均匀扩展增强, 倾向于使自旋弛豫时间减小。因而, 在  $\tau$ - $T$  的曲线中, 峰会倾向于向低温区 (小于  $T_f^h$  的方向) 移动。这个效应的强弱依赖于自旋轨道耦合的具体形式。当自旋轨道耦合对动量以线性 (三次方) 的形式依赖时, 该效应是温和的 (强烈的)。这里, 在 Si/SiGe 量子阱中, 空穴处在强散射区且库仑散射主导 (见后面的讨论), 同时线性 Rashba 项更重要。因而  $\tau$ - $T$  曲线的峰在  $T_f^h$  附近。但是, 当空穴浓度足够低使得在整个考察的温度范围内空穴都处于非简并区, 自旋弛豫时间随着温度单调下降, 如图 5-8 左图中的实线所示。

和上面类似的现象在自旋弛豫时间对空穴浓度的依赖中也被期望出现, 因为在二维 (三维) 体系中, 库仑散射率在简并区  $\propto N_h^{-1}$  ( $N_h^{-2/3}$ ), 而在非简并区  $\propto N_h$  [545, 546]。事实上确实如此 [300, 322], 如图 5-8 右图所显示的那样。然而, 当温度足够高使得在所考虑的浓度范围内空穴都处在非简并区时, 自旋弛豫时间随着浓度单调上升, 如图 5-8 右图中的点线所示。

在图 5-9 左图中, 我们给出了在不同杂质浓度下自旋弛豫时间对温度的依赖。该图表明, 增加杂质浓度会使得自旋弛豫时间变长。这是因为这里空穴处于强散射区 [11, 277, 281, 300, 506]。随着杂质浓度  $N_i$  的增加, 在低温区对温度不敏感的空穴-杂质散射变得重要。因此, 在  $\tau$ - $T$  曲线中由库仑散射率对温度的非单调依赖导致的峰变得不再明显或者甚至消失 [277, 300]。这也是为什么这种峰在高迁移率的样品中更容易被实验观察到的原因 [277, 294]。同时我们也注意到在室温附近, 空穴-杂质散射对自旋弛豫的影响非常微弱, 这是因为杂质散射率随着载流子平均动量的增加而减小 [547]。

为了了解不同散射在自旋弛豫过程中的相对重要性, 我们在不同的散射情况下计算了自旋弛豫并在图 5-9 右图中给出了其对空穴浓度的依赖。 $T$  取为 300 K。在图 5-9 右图 (a) 中, 杂质的浓度  $N_i = 0$ 。实线对应所有散射都考虑了的情形 (包含空穴-空穴的库仑散射、空穴-光学声子散射以及空穴-声学声子的散射)。短划线、点线和链线分别对应没有空穴-光学声子散射、没有空穴-声学声子散射以及没有空穴-空穴库仑散射的情形。通过对比这四条线, 可以发现: (I) 即使在室温下, 空穴-空穴库仑散射也比空穴-声子散射重要; (II) 声学声子比光学声子相对来说要重要一些 [光学声子能量  $\hbar\omega_{op}$  高达 63 meV, 而由于空穴大的平面内有效质量 ( $0.27m_0$ ), 空穴的费米能很低]。事实上, 在我们所研究的范围内空穴系统处在强散射区, 而当人为的把空穴-空穴库仑散射去掉后, 空穴会进入弱散射区。这一点可以通过比较图 5-9 右图 (b) 中的两组曲线看出来。其中有空穴-空穴库仑散射的一组 (实线和短划线) 表明增加少量杂质会使自旋弛豫时间  $\tau$  变长, 这对应于强散射情形。而另外没有空穴-空穴库仑散射的一组 (链线和点线), 则在增加少量杂质时显示出相反的效应 ( $\tau$  变小), 这是在弱散射区的典型特征 [11, 281]。

最后, 我们研究自旋弛豫对门电压导致的电场的依赖。在图 5-10 左图中, 我们给出不同温度下空穴的自旋弛豫时间  $\tau$  对电场  $E$  的依赖。对于每一个温度, 我们选择合适的电场范围, 以排除空穴第二子带的贡献。可以发现, 随着电场强度的增加, 自旋轨

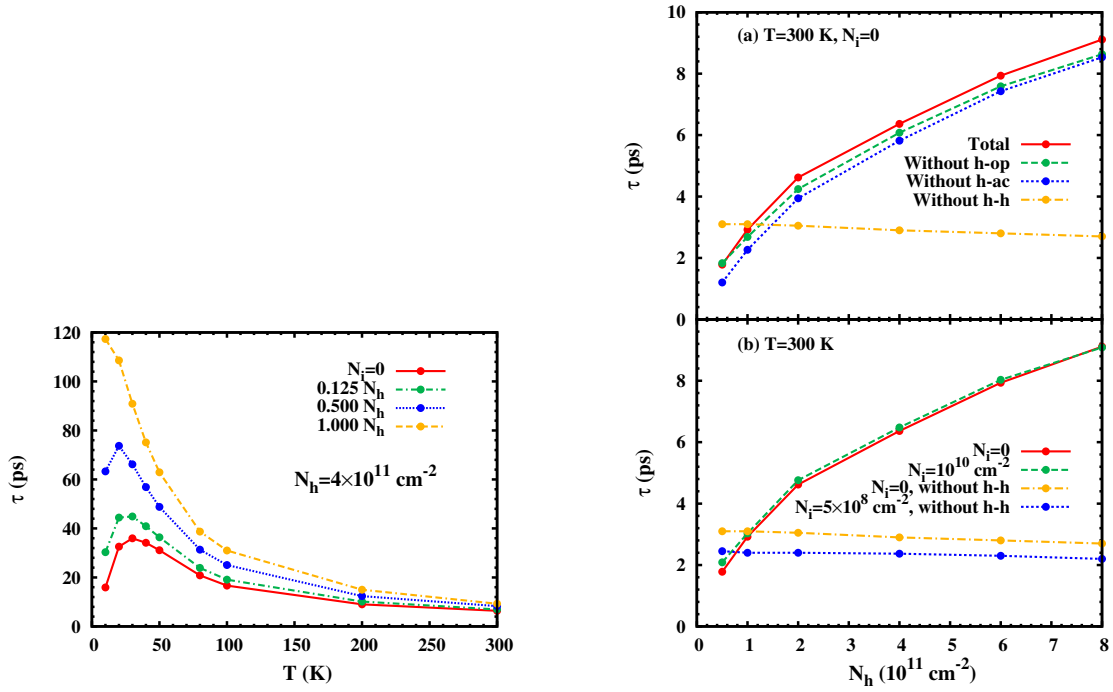


图 5-9: 左图: Si/SiGe 量子阱中不同的杂质浓度下自旋弛豫时间  $\tau$  随温度的依赖关系。空穴浓度是  $N_h = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , 电场强度是  $E = 300 \text{ kV/cm}$ 。右图: Si/SiGe 量子阱中不同的散射下, 自旋弛豫时间  $\tau$  对空穴浓度  $N_h$  的依赖。  $T = 300 \text{ K}$  以及  $E = 300 \text{ kV/cm}$ 。(a) 实线: 包含所有散射 [空穴-空穴的库仑散射 (h-h), 空穴-光学声子散射 (h-op) 以及空穴-声学声子的散射 (h-ac)]; 短划线: 没有空穴-光学声子散射; 点线: 没有空穴-声学声子散射; 链线: 没有空穴-空穴库仑散射。所有四种情况都在没有杂质的条件下进行计算。(b) 实线: 有空穴-空穴的库仑散射, 空穴-光学声子散射以及空穴-声学声子的散射; 短划线: 和实线一样, 但是包含了空穴-杂质的散射 ( $N_i = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ); 链线: 包含空穴-光学声子散射和空穴-声学声子散射; 点线: 和链线一样, 但是包含了空穴-杂质散射 ( $N_i = 5 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ )。

道耦合增强, 自旋弛豫时间变短。此外, 作为与  $E = 300 \text{ kV/cm}$  下自旋弛豫的对比, 我们在图 5-10 右图中还画出了  $E = 600 \text{ kV/cm}$  下自旋弛豫对空穴浓度和温度的依赖。在两种依赖中, 库仑散射导致的峰仍旧存在。另外, 虽然门电压有所变化, 峰的位置基本保持不变。这是因为 Rashba 自旋轨道耦合的线性项主导, 其系数随着电场的变化并不会导致非均匀扩展对温度/浓度的依赖的变化。

#### 5.4.2.2 Ge/SiGe 量子阱中的空穴自旋弛豫

接下来我们研究 Ge/Si<sub>0.3</sub>Ge<sub>0.7</sub> 量子阱中的空穴自旋弛豫。在图 5-7(b) 中, 我们画出了  $E = 300 \text{ kV/cm}$  时最低重空穴子带的空穴在  $z$  方向的分布 (链线)。在图 5-11 左图中, 我们画出了在电场  $E = 300 \text{ kV/cm}$  下 [相对应的,  $\frac{\hbar}{2}\Lambda = -6.06 \text{ meV nm}^3$ , 如图 5-7 右图 (b) 中所示] 自旋弛豫时间  $\tau$  对温度  $T$  的依赖。结果显示, Ge/SiGe 量



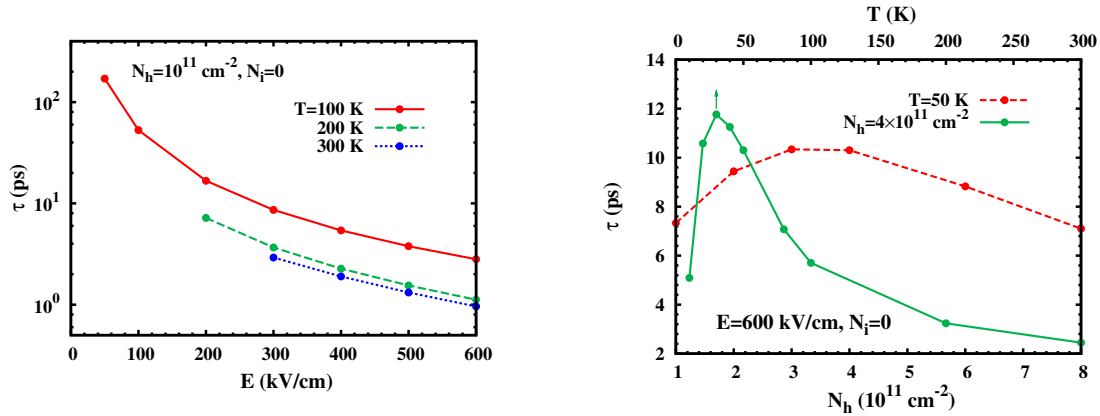


图 5-10: 左图: Si/SiGe 量子阱中不同温度下自旋弛豫时间  $\tau$  对门电压导致的电场  $E$  的依赖。空穴浓度是  $N_h = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  而杂质浓度是  $N_i = 0$ 。右图: Si/SiGe 量子阱中在门电压导致的电场  $E = 600 \text{ kV/cm}$  下的自旋弛豫。短划线: 在温度  $T = 50 \text{ K}$  时, 自旋弛豫时间  $\tau$  对空穴浓度  $N_h$  的依赖; 实线: 在空穴浓度  $N_h = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  时自旋弛豫时间  $\tau$  对温度 (刻度在上边) 的依赖。  $N_i = 0$ 。

子阱中的空穴自旋弛豫时间比 Si/SiGe 量子阱中的空穴自旋弛豫时间短很多。这是因为在 Ge/SiGe 量子阱中自旋轨道耦合相互作用相对较强 (Ge 比 Si 原子重), 而且 Rashba 项对动量是三次方依赖 [参考方程 (2.44)-(2.46)], 因而非均匀扩展也相对变强。除了快的自旋弛豫, 还有一个新的现象出现。即当空穴浓度相对较高的时候, 在  $\tau$ - $T$  曲线中, 不仅仅出现了峰, 还在这个峰之前出现了一个谷。

和 Si/SiGe 量子阱中库仑散射导致的峰在费米温度附近的情形不一样 (图 5-8 左图), 在这里这个峰处在温度  $T_f^h/2$  附近 (对于空穴浓度  $N_h = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $T_f^h \approx 170 \text{ K}$ )。这是因为这里 Rashba 自旋轨道耦合对动量三次方依赖 (不同于 Si/SiGe 量子阱线性的 Rashba 项占主导), 使得非均匀扩展随着温度升高而增强的效应很明显。考虑到这个效应,  $\tau$ - $T$  的曲线中的峰相对于费米温度会向低温区移动。通过对比图 5-11 左图中高温区  $N_i = 0$  的四条曲线, 我们发现自旋弛豫时间  $\tau$  随着空穴浓度  $N_h$  的增加而单调下降。这和 Si/SiGe 量子阱中的情形 (图 5-8 右图中的点线) 不一样。这是因为这里 Rashba 项对动量三次方依赖, 使得非均匀扩展随着浓度的增大以  $N_h^3$  的形式强烈增强。

上面提到的峰与从简并到非简并的过渡相联系, 但是图 5-11 左图中的谷则与从弱到强的散射过渡相联系。当温度足够低而且空穴浓度高的时候, 空穴系统是高度简并的, 因而使得占主导作用的库仑散射也变弱。这种情况下, 空穴系统进入弱散射区。因而当温度从非常低的值开始上升, 散射的增强首先使得自旋弛豫时间变短, 直到进入强散射区, 然后使得自旋弛豫时间变长。这个过程导致了  $\tau$ - $T$  曲线在简并区的谷的出现。为了验证在空穴高度简并时确实进入了弱简并区, 我们在图 5-11 左图中的点线对应的情形下增加了一点杂质 (链线)。我们再次看见, 在弱 (强) 散射区, 引入少量杂质增强散射, 自旋弛豫时间会变小 (变大)。

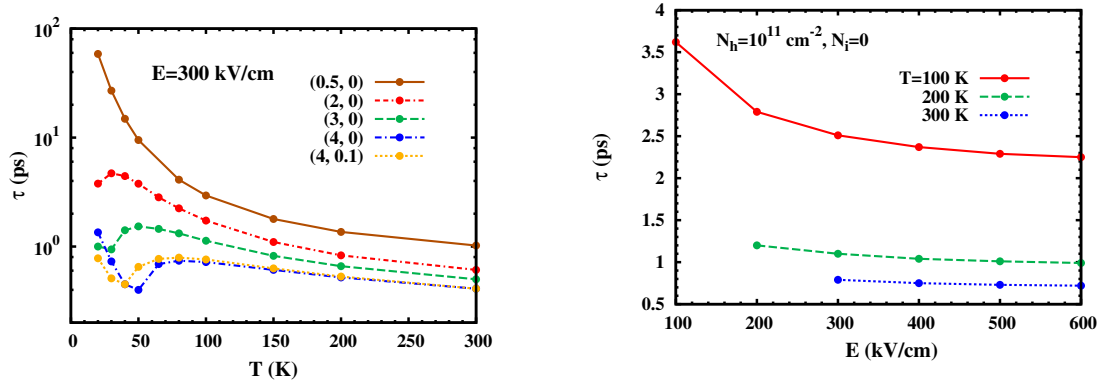


图 5-11: 左图: 在 Ge/SiGe 量子阱中空穴自旋弛豫时间  $\tau$  随温度  $T$  的依赖。电场强度  $E = 300$  kV/cm。被 (a, b) 标记的曲线对应于空穴浓度  $N_h = a \times 10^{11}$  cm $^{-2}$  以及杂质浓度  $N_i = b \times 10^{11}$  cm $^{-2}$ 。右图: Ge/SiGe 量子阱中在不同温度下自旋弛豫时间  $\tau$  对电场强度  $E$  的依赖。空穴浓度  $N_h = 10^{11}$  cm $^{-2}$ , 杂质浓度  $N_i$  取为零。

最后我们研究自旋弛豫对电场的依赖。在图 5-11 右图中, 我们在不同温度下画出了空穴自旋弛豫时间  $\tau$  对电场  $E$  的依赖。该图显示, 在大电场区, 自旋弛豫时间随着电场的增大缓慢减小。这和大电场区 Rashba 自旋轨道耦合强度对电场的微弱依赖相对应 [图 5-7 右图 (b) 中的点线]。

### 5.4.3 小结

在这一个小节中, 我们研究了大门电压和应力作用下非对称的 (001) Si/Si $_{0.7}$ Ge $_{0.3}$  (Ge/Si $_{0.3}$ Ge $_{0.7}$ ) 量子阱中最低空穴子带上的自旋弛豫。首先, 我们从六带的 Luttinger  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  模型出发, 利用子带的 Löwdin 块对角化方法得到最低子带的有效哈密顿量, 包括 Rashba 型的自旋轨道耦合。由于双轴应力的影响, Si/SiGe 量子阱中的最低子带是轻空穴型的, 而 Ge/SiGe 量子阱中的最低子带是重空穴型的。接着我们从这个有效的哈密顿量出发, 利用动力学的自旋 Bloch 方程方法, 研究空穴的自旋弛豫。我们发现, 库仑散射的贡献非常重要, 它导致自旋弛豫时间对温度和浓度依赖中峰的出现。此外, 它还在 Ge/SiGe 量子阱中导致自旋弛豫时间对温度的依赖中的谷的出现, 这个现象与空穴系统从弱到强的散射区的转变相联系。杂质浓度以及门电压导致的电场对自旋弛豫的影响也被研究。在 Si/SiGe (Ge/SiGe) 量子阱中, 在我们研究的范围内, 空穴的自旋弛豫时间在 1~100 ps (0.1~10 ps) 的量级。这些时间尺度比 Si/SiGe 量子阱中电子的自旋弛豫时间 ( $10^{-7} \sim 10^{-5}$  s 的量级 [548–550]) 短很多。同时, 和 GaAs 量子阱的空穴比起来, Si/SiGe (Ge/SiGe) 量子阱中空穴的自旋弛豫时间要长 (相比拟)。

## 5.5 非平衡声子对热化电子的自旋弛豫的影响

正如上面的研究中所表明的，在自旋弛豫的过程中，散射扮演了很重要的角色。在通常情况下，参与电声散射的声子都被处理成是平衡的。在近平衡体系中这是很好的近似。但是，当载流子系统远离平衡时（比如通过电场驱动或者激光激发），载流子的能量弛豫主要通过声子发射实现，此时如果声子的弛豫时间接近或者大于载流子-声子的散射时间，则声子可以被载流子显著地驱离平衡态。远离平衡的声子反过来可以影响电子的动力学包括自旋动力学的行为。事实上，非平衡声子下的热电子输运已经有所研究 [551-559]。这些研究表明，和将声子处理成平衡的情况比起来，包含非平衡声子的计算结果和实验上得到的电子能量弛豫率和迁移率更符合 [553-555]。这些研究同时也间接表明，在远离平衡的热电子系统中，有必要将声子处理成非平衡的，因为这些声子可以通过调制电子的热化和漂移来影响自旋的弛豫。

在本章的最后一节，我们研究  $n$  型 GaAs 量子阱中非平衡的纵向光学声子对热电子的自旋弛豫的影响 [509]。在量子阱平面内的电场作用下，纵向光学声子被电子驱动到非平衡态。和将声子处理成平衡态的情形比起来，在非平衡声子下，电子的热化被加强，电声散射增强，自旋弛豫时间因而变长。但是，和电子漂移速度近似成正比的自旋进动频率，既可以变大（低电场和/或高晶格温度下）也可以变小（高电场和/或低晶格温度下）。我们还发现，在电子浓度高以及杂质浓度低时，非平衡声子的效应更明显。

### 5.5.1 模型

我们的研究对象是沿着  $[001]||\hat{z}$  方向生长的 GaAs 量子阱。阱宽  $a = 5 \text{ nm}$ 。在这个阱宽以及合适的电子浓度  $N_e$ ，晶格温度  $T_L$  和电场强度  $E$  ( $E \leq 1 \text{ kV/cm}$ ) 下，只需要考虑最低电子子带。由于电子波函数在  $\hat{z}$  方向的局域性，电子-声子散射在空间是不均匀的，也即，声子的吸收和放出过程主要发生在电子波函数分布大的量子阱内。如果声子弛豫很快或者声子（比如声学声子）能够很容易地穿过量子阱界面，这时声子可以被认为是平衡的，且具有体声子的模式。在我们的研究中，我们假设声学声子是平衡的，而纵向光学（LO）声子是非平衡的 [552-554, 556-558]。为了研究和非平衡的 LO 声子在空间上非均匀耦合的电子系统的自旋弛豫，我们将描述电子的动力学自旋 Bloch 方程和描述准二维的 LO 声子 [553-555] 的速率方程 [方程 (5.14)] 联合起来，也即，

$$\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} = \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{\text{dri}} + \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{\text{coh}} + \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{\text{scat}}, \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial n_{\mathbf{q}}}{\partial t} = \left. \frac{\partial n_{\mathbf{q}}}{\partial t} \right|_{\text{scat}}. \quad (5.14)$$

在这里，因为 LO 声子被处理成准二维的，动力学自旋 Bloch 方程中电子-LO 声子的散射项需要做一点变化（在声子的平衡态极限，该处理不导致任何实质变化） [553–555]，

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{e-LO}} &= \frac{\pi}{A} \sum_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^2 \{ \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + \hbar\omega_0) [(n_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} + 1)\rho_{\mathbf{k}'}(1 - \rho_{\mathbf{k}}) - n_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}(1 - \rho_{\mathbf{k}'})\rho_{\mathbf{k}}] \\ &\quad + \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \hbar\omega_0) [n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}\rho_{\mathbf{k}'}(1 - \rho_{\mathbf{k}}) - (n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} + 1)(1 - \rho_{\mathbf{k}'})\rho_{\mathbf{k}}] \} + \{\dots\}^\dagger, \end{aligned} \quad (5.15)$$

声子速率方程 (5.14) 中的散射项为

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial n_{\mathbf{q}}}{\partial t} \right|_{\text{scat}} &= -\frac{n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{q}}^0}{\tau_{pp}} - \frac{2\pi}{A} M_{\mathbf{q}}^2 \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \hbar\omega_0) \\ &\quad \times \{ \text{Tr}[(1 - \rho_{\mathbf{k}})\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}]n_{\mathbf{q}} - \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(1 - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})](n_{\mathbf{q}} + 1) \}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

在上面的方程中， $A$  是量子阱平面的面积， $M_{\mathbf{q}}^2 = \frac{1}{L} \sum_{q_z} g_{qq_z}^2 |I(iq_z)|^2$  是电子-LO 声子的散射矩阵元，其中  $g_{qq_z}^2 = \frac{e^2\omega_0}{2\hbar^2\epsilon_0(q^2+q_z^2)} (\kappa_{\infty}^{-1} - \kappa_0^{-1})$  [524]。  $L$  是样品在  $\hat{\mathbf{z}}$  方向的尺度。方程 (5.16) 右边的第一项代表声子-声子散射导致的声子弛豫，采用了弛豫时间近似。  $n_{\mathbf{q}}^0 = [\exp(\hbar\omega_0/k_B T_L) - 1]^{-1}$  是和 AC 声子达到平衡时的准二维的 LO 声子的数目。弛豫时间  $\tau_{pp}$  贡献自非谐振的晶格振动，依赖于声子动量和晶格温度。但是，为简单起见，我们假设  $\tau_{pp}$  是一个只依赖于晶格温度的常数。我们采用 Vallée 和 Bogani 从时间分辨的相干反 Stokes 拉曼散射实验拟合得到的经验公式 [560]， $\tau_{pp}(T_L) = \tau_{pp}^0 / \{1 + [\exp(0.2\hbar\omega_0/k_B T_L) - 1]^{-1} + [\exp(0.8\hbar\omega_0/k_B T_L) - 1]^{-1}\}$ ，其中  $\tau_{pp}^0 \equiv \tau_{pp}(0) \approx 9$  ps [560]。这个公式实际上描述了  $\Gamma$  点附近的一个 LO 声子弛豫成另一个  $L$  点附近的 LO 声子和一个横向 AC 声子的过程。在有非平衡 LO 声子的情况下对热电子输运的研究中，上面这种对声子-声子散射项的弛豫时间近似被广泛采用 [553–557]。

### 5.5.2 数值结果

我们数值地求解动力学自旋 Bloch 方程和声子速率方程联立的方程组。杂质浓度取为 0，电场  $\mathbf{E} = -E\hat{\mathbf{x}}$ ，其中  $E \geq 0$ 。除非特别说明，我们没有施加任何磁场。初始的自旋极化为  $P_0 = 0.05$ ，自旋极化方向为  $\hat{\mathbf{z}}$  方向。  $N_e = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  是电子的面密度。自旋弛豫时间  $\tau$  从自旋极化  $P(t) = \frac{1}{AN_e} \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(t)\sigma_z]$  的时间演化得到，电子的漂移速率是  $\mathbf{v}(t) = \frac{1}{AN_e} \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(t)]\hbar\mathbf{k}/m^* = v_x(t)\hat{\mathbf{x}}$  的稳态值，而热电子温度  $T_e$  通过拟合漂移费米分布的 Boltzmann 形的尾巴得到 [490, 506, 553]。

在图 5-12 中，我们在动量空间给出了非平衡的电子和 LO 声子的典型的稳态分布。图 5-12(a) 和 (c) 表明，在沿着  $-\hat{\mathbf{x}}$  方向的电场下，电子获得了沿  $\hat{\mathbf{x}}$  方向的漂移速率。图 5-12(b) 和 (d) 给出了对应的非平衡的 LO 声子的分布。可以发现，具有很大或者很小的动量（动量空间的边缘或者中心位置）的 LO 声子和 AC 声子基本达到平衡。这是

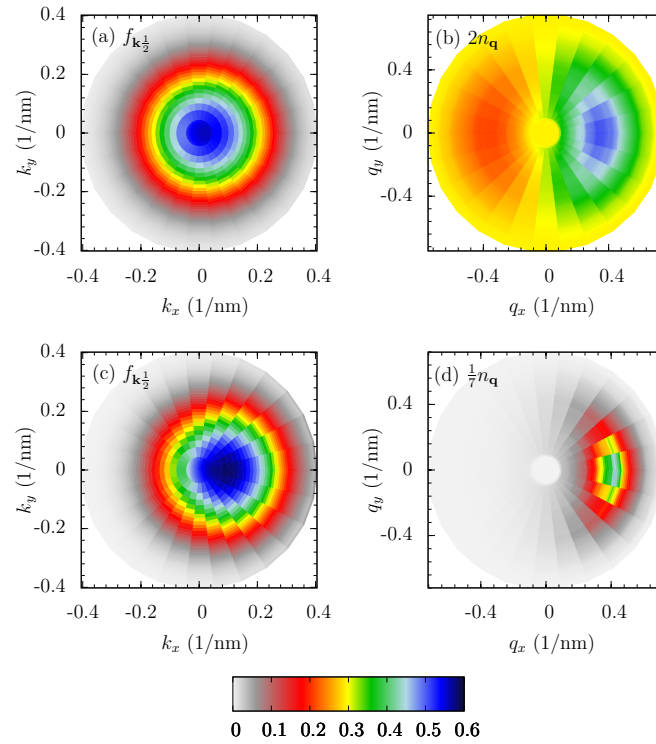


图 5-12: 非平衡电子 [(a) 和 (c)] 以及非平衡 LO 声子 [(b) 和 (d)] 在动量空间的典型稳态分布。(a) 和 (b):  $T_L = 200$  K 以及  $E = 0.3$  kV/cm; (c) 和 (d):  $T_L = 50$  K 以及  $E = 1$  kV/cm。注意到在 (b) 和 (d) 中, LO 声子的分布  $n_{\mathbf{q}}$  分别被乘以了 2 和  $\frac{1}{7}$ 。

由于这些动量区域的 LO 声子和电子的散射很弱。因而, 在这些区域的 LO 声子的分布基本是晶格温度决定的平衡分布。而具有中等动量的 LO 声子, 则被热电子驱离到离开平衡态很远。在  $T_L = 200$  K 以及  $E = 0.3$  kV/cm [图 5-12(b)] 的情况下,  $q_x > 0$  声子更多的被放出, 因而在该动量区域形成一个峰; 而  $q_x < 0$  的声子更多的被吸收, 因而在该动量区域形成一个谷。随着  $T_L$  的降低或者  $E$  的增大,  $q_x < 0$  区域的谷被压制甚至消失, 如图 5-12(d) 所示。在各种情况下, LO 声子的总数目 (分布在动量空间的求和) 增大, 而且获得了净的正动量。

在图 5-13(a) 中, 我们给出了 LO 声子处理为平衡时, 得到的电子漂移速度  $v_x$  对电场的依赖。同时在图 5-13(b) 中, 我们也给出了在 LO 声子分别被处理为非平衡和平衡时所得到的漂移速度  $v_x$  的比值。从图 5-13(b), 我们可以注意到, 当非平衡的声子被考虑时,  $v_x$  可以增大或减小, 依赖于具体的情况。这个现象和之前文献中给出的结果一致 [552, 553, 556]。事实上, 非平衡声子对热电子的运输的影响包括两个竞争的效应: 从非平衡的声子系统中重吸收的动量倾向于增加电子的迁移率; 而加强了的电子热化效应会增强电子-声子散射 (包括电子-AC 声子散射和电子-LO 声子散射都会增强), 从而倾向于降低电子的迁移率 [552, 553, 556]。通常来说, 前 (后) 一个效应在低 (高)

的电场区和/或高（低）温下主导 [552, 553, 556]，正如图 5-13(b) 所表明的那样。如前面看到的，当电场低和/或晶格温度高的时候，LO 声子分布在  $q_x < 0$  的区域的谷很明显，因而电子通过吸收  $q_x < 0$  的声子向后散射的过程被压制，于是电子分布的峰的位置向正动量方向位移明显。最后，当晶格温度足够高的时候（比如， $T_L = 300$  K），非平衡声子的效应变弱而且对电场不那么敏感。造成这种现象的原因是高温下电子的热化效应不再显著，而且 LO 声子的弛豫时间也变短（ $T_L = 300$  K 时  $\tau_{pp} \approx 1.9$  ps） [560]。

在图 5-13(c) 中我们给出了 LO 声子处理为平衡时，不同晶格温度下，热电子温度  $T_e$  对电场  $E$  的依赖。从该图中可以看见当电场大、晶格温度低时，电子的热化效应更明显 [300, 490, 506]。我们还注意到，曲线  $T_e/T_L - E$  在  $T_L = 50$  K 时几乎是线性的，但是当  $T_L \geq 100$  K 时，该曲线偏离线性。描述电子从电场的能量获得速率和电声散射导致的能量损失速率间的平衡的方程确立热电子的温度。当  $T_e - T_L \leq T_L$  时，有 [561]

$$T_e/T_L = 1 + \mu e E^2 / \alpha, \quad (5.17)$$

这里  $\mu$  是电子的迁移率， $\alpha/T_L$  是能量转移系数。如果  $\mu$  和  $\alpha$  都与  $T_e$  无关，则  $T_e$  随着  $E$  平方增大。但是，实际情况并非如此。 $\mu$  和  $\alpha$  都与散射相关，因而对  $T_e$  有依赖关系。所以  $T_e$  与  $E$  的关系并非显而易见。但是，对于某些特殊的情形，这两者的关系是可以确立的。例如，如果电子-AC 声子散射主导能量的弛豫，则在  $\mu_0 E \ll v_s$  ( $\mu_0 E \gg v_s$ ) 时， $T_e$  随着  $E$  的增大而平方（线性）增大 [561]。这里  $\mu_0$  是  $T_e = T_L$  时电子的迁移率， $v_s$  是声速。因而，在  $T_L = 50$  K 时，图中给出的  $T_e/T_L$  对  $E$  的线性依赖可以如下理解。在这个温度下，能量的弛豫主要通过电子-AC 声子散射进行，而且  $\mu_0 E$  随着电场增大可以很容易的超过声速  $v_s$ 。利用  $\mu_0 \approx 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  [如图 5-13(a) 中的数据所表明的] 以及  $v_s \approx 5 \times 10^5 \text{ cm/s}$ ，我们可以估算出在  $T_L = 50$  K 时由  $\mu_0 E = v_s$  给出的临界电场小到  $5 \text{ V/cm}$ 。因而，在图中的电场范围内， $T_e/T_L$  基本显示出对  $E$  的线性依赖。当  $T_L$  增大时，LO 声子变得重要，电子的迁移率下降。因为这些因素， $T_e/T_L - E$  曲线偏离线性关系，如图 5-13(c) 中  $T_L \geq 100$  K 的曲线所表明的。

在图 5-13(d) 中，我们给出了不同电场下 LO 声子分别处理为非平衡和平衡时得到的  $T_e$  的比。可以发现，当声子被处理为非平衡时，电子的热化确实被加强 [553, 556, 557]。此外，当  $T_L$  比较低时， $\eta_{T_e}$  对电场显示出非单调的依赖。这是由于在非平衡声子存在的情况下，随着电场的增大，LO 声子的数目增多，因而通过电子-LO 声子散射的能量弛豫率增大。当晶格温度低的时候，这个效应更明显。因为这时纵向 LO 声子的弛豫时间比较长（ $T_L = 50$  K 时  $\tau_{pp} = 7.3$  ps） [560]，随着电场的增大，LO 声子数目能够更显著的增多。

最后我们考察自旋的弛豫。图 5-13(e) 展示了各种不同晶格温度下自旋弛豫时间  $\tau$  对电场的依赖。可以看见，在我们研究的电场范围内， $\tau$  基本随着  $E$  的增大而增大。两个原因导致了这个现象：(I) 在沿着  $-\hat{x}$  方向的电场下，Dresselhaus 自旋轨道

耦合在  $-\hat{x}$  方向会产生净的磁场 [490, 506]。在这个净磁场下，自旋开始进动，从而混合平面内和平面外的自旋弛豫 [324, 503]。由于 (001) GaAs 量子阱中平面内的自旋弛豫率比平面外的要小，因此这个混合使得自旋弛豫时间变长 [324, 503]。(II) 电子的热化加强电声散射，而电子系统处在强散射区，因而弛豫时间变长。这个效应在低的晶格温度下明显（热化明显）[如图 5-13(c) 所显示的]，也正是  $T_L \sim 50-100$  K 的情形下在  $E > 0.05$  kV/cm 后  $\tau$  随着  $E$  持续增大的原因。为了让这里面的物理更清楚，我们在  $T_L = 50$  和 300 K 的情况下，沿着  $-\hat{x}$  方向施加  $B = 2$  T 的磁场。对应的自旋弛豫时间对电场的依赖在图 5-13(e) 中分别用空心方框 ( $T_L = 50$  K) 和空心圆圈 ( $T_L = 300$  K) 表示。在这个大的外加磁场下，即使在没有外加电场的情况下，平面内和平面外的自旋弛豫已经有效混合。我们发现，对于  $T_L = 300$  K 的情形， $\tau$  随着电场几乎保持不变，而对于  $T_L = 50$  K 的情形， $\tau$  还会由于强的热化效应随着  $E$  继续增加。最后，注意到对于  $T_L = 300$  K 的情形，在  $E$  接近 1 kV/cm 时， $\tau$  随着  $E$  有微弱的下降。这是由于漂移和热化的效应加强了非均匀扩展，从而使得自旋弛豫时间开始变短。这个效应在晶格温度比较高的时候更容易发生 [490, 506]。最后我们关注利用非平衡 LO 声子计算得到的自旋弛豫时间和用平衡 LO 声子计算得到的自旋弛豫时间的比值 [图 5-13(f)]。当 LO 声子被考虑为非平衡时，由于电声散射的加强，自旋弛豫时间变长。但是当晶格温度很高时（比如， $T_L = 300$  K），非平衡声子对  $\tau$  的影响非常微弱。

我们已经指出，在沿着  $\hat{x}$  方向的电场下，Dresselhaus 自旋轨道耦合会在该方向诱导强度正比于漂移速度  $v_x$  的有效磁场，导致自旋的进动。因而当  $v_x$  被非平衡声子有效调制时，自旋进动频率也会随着  $v_x$  的变化而变化。在图 5.5.1(a) 中，我们给出了平衡 LO 声子和非平衡 LO 声子下典型的自旋进动信号。图 5.5.1(b) 给出了 LO 声子的两种不同处理情况下自旋进动频率的比值（只在自旋进动信号可以很好分辨的电场区域给出）。和漂移速度一样，将 LO 声子处理为非平衡后，自旋进动频率可以变大，也可以变小。

最后，我们的计算还发现，非平衡声子对电子迁移率、电子热化和电子自旋弛豫的影响随着电子浓度的降低和杂质浓度的增大而减弱。这是因为 LO 声子是被电子驱离平衡态的，而电子-杂质散射的增强会抑制电子-LO 声子散射的影响。

### 5.5.3 小结

在这一小节中，我们研究了非平衡 LO 声子对  $n$  型 (001) GaAs 量子阱中热电子自旋弛豫的影响。我们发现，将 LO 声子考虑为非平衡声子后，和以平衡态处理的情况相比，电子的漂移速度可以变大或者变小。与电子漂移速度近似成正比的自旋进动频率也随之改变。而由于考虑进 LO 声子的非平衡效应后，电声散射增强，因而自旋弛豫时间变长。非平衡声子的这些效应在电子浓度高和杂质浓度低的时候明显。需要指出的是，最近，Sun 等人在研究石墨烯中光激发下载流子的动力学时，将声子的动力学也考虑成非平衡的，得到了和实验观测一致的微分透射率的时间演化 [492, 562]。

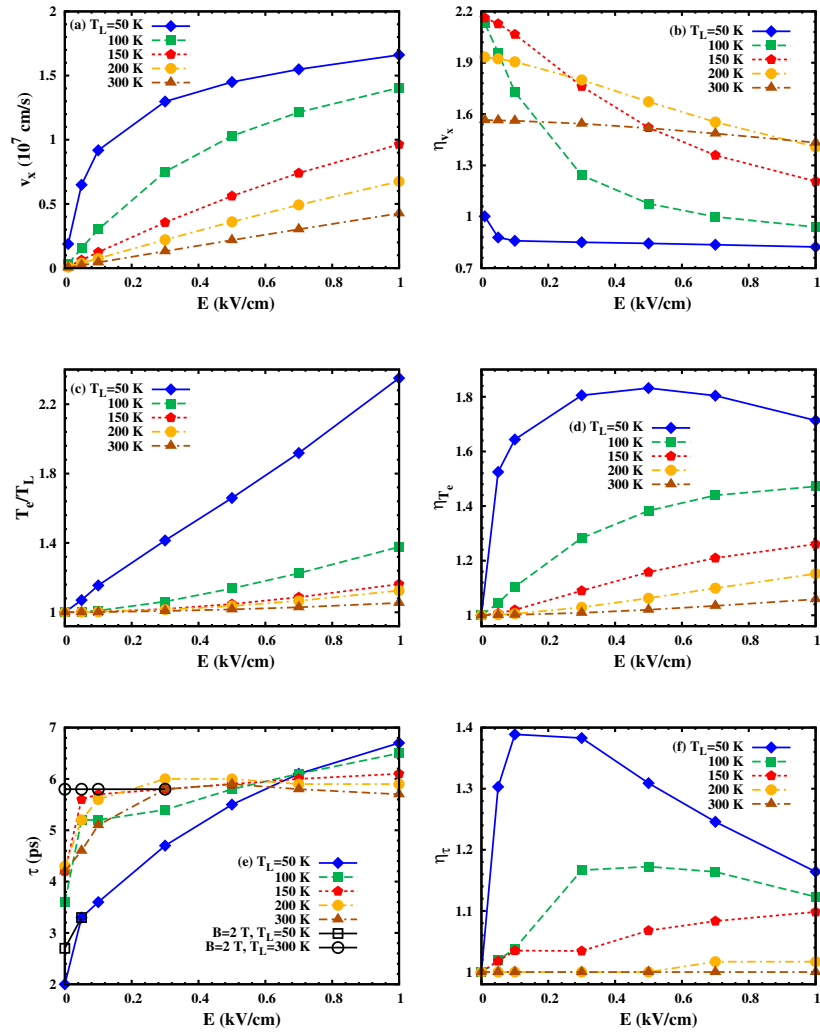


图 5-13: 左列: 在 LO 声子处理为平衡时所得到的电子漂移速度  $v_x$  (a), 热电子温度  $T_e$  (c), 以及自旋弛豫时间  $\tau$  (e) 对电场的依赖。右列: 在非平衡 LO 声子下计算得到的  $v_x$  (b),  $T_e$  (d) 以及  $\tau$  (f) 与利用平衡 LO 声子进行计算得到的相应的值的比。在图 (e) 中, 带空心方框和空心圆圈的线是在  $T_L = 50$  K 以及  $300$  K 下存在沿着  $-\hat{x}$  方向的  $B = 2$  T 的磁场时自旋弛豫时间对电场的依赖。对于  $T_L = 50$  K ( $T_L = 300$  K) 的情况, 在  $E > 0.05$  kV/cm ( $E > 0.3$  kV/cm) 时, 自旋弛豫时间和没有磁场时的基本相同, 因而图中没有画出。

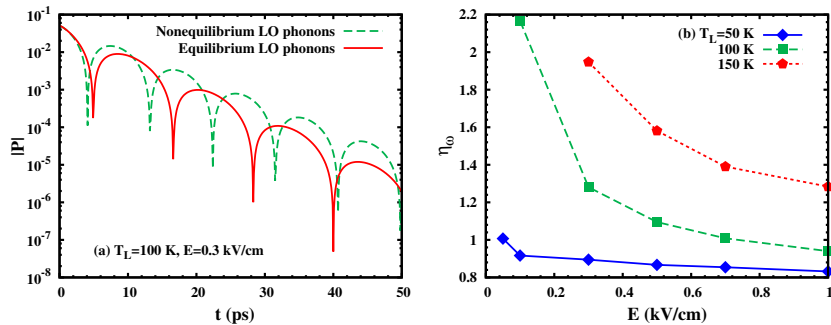


图 5-14: (a) 平衡 LO 声子和非平衡 LO 声子下典型的自旋进动信号。自旋极化的绝对值  $|P|$  画在对数坐标系下。  $T_L = 100$  K 以及  $E = 0.3$  kV/cm。 (b) LO 声子的两种不同处理情况下自旋进动频率的比值。



## 第六章 半导体量子阱中的自旋输运

### 6.1 研究背景

在上一章我们研究了半导体量子阱中的自旋弛豫。现在我们研究半导体量子阱中的自旋输运。对于基于半导体的自旋电子学器件的实现而言，半导体中自旋输运的研究和自旋弛豫的研究同样重要。

在实验上对半导体中二维电子系统的自旋输运有一些研究。Hu 等人通过集成了铁磁电极的 InAs 量子阱中自旋输运的研究验证了利用铁磁电极向半导体进行自旋注入和探测的有效性 [185]。Wunderlich 等人在  $p$  型 GaAs 的二维电子系统中观察到了自旋霍尔效应 [79]。Weber 等人在  $n$  型 GaAs 量子阱中利用自旋栅实验观察到了自旋的库仑拖拽 (spin Coulomb drag) 效应 [563]。最近，Koo 等人在 InAs 量子阱的非局域自旋阀结构中进行了自旋输运对门电压 (门电压可以调控 Rashba 自旋轨道耦合) 依赖的测量，并报告实现了 Datta-Das 场效应晶体管 [81]。

对于半导体中的自旋输运，理论上的研究手段有漂移扩散模型 (章节 1.5)，Monte Carlo 模拟 [564]，以及建立在动力学自旋 Bloch 方程上的完全微观的模型。基于动力学自旋 Bloch 方程，Cheng 等人对 GaAs 量子阱中的自旋输运已经进行了深入的研究 [276, 493]。他们发现，即使没有外加磁场，自旋极化矢量在输运过程中也会有进动，而且进动的周期对沿着输运方向施加的电场不敏感。这些现象已经被体材料中的实验证实 [522, 565]。他们还发现，在散射 (哪怕是库仑散射) 足够强时，不同电子的动量虽然不一样，但是自旋在空间的进动频率趋向一致 [276]。此外，在具有可比的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的 (001) GaAs 量子阱中，他们发现自旋扩散对自旋极化方向和自旋注入方向都表现出很强的各向异性 [493]。Sun 等人利用动力学自旋 Bloch 方程研究了 InAs 量子阱中的自旋输运，并拟合了 Koo 等人的实验数据 [81]，证明了 Koo 等人的实验实现了二维 Datta-Das 场效应晶体管的原型器件 [85]。Weng 等人在动力学自旋 Bloch 方程的框架下研究了  $n$  型 GaAs 量子阱中自旋栅里的自旋输运和弛豫过程，给出了自旋扩散系数和自旋弛豫时间的关系 [566]。

在这一章，我们研究对称的 Si/SiGe 量子阱中的自旋输运。由于 Si 本身就具有体的反演对称，因而在对称的 Si/SiGe 量子阱中，Dresselhaus 和 Rashba 的自旋轨道耦合均不存在，所以在该系统中不存在 DP 的自旋弛豫机制。在此情形下，如果施加外磁场，在时间域上自旋只会纯粹的相干进动而不会有整体弛豫。但是在输运的过程中，情形会变得不同。正如在 4.3 章节中所指出的那样，即使没有自旋轨道耦合导致的有效磁

场，在有外磁场存在的条件下，自旋在输运过程中仍具有依赖于动量的实空间进动频率  $\frac{g\mu_B \mathbf{B}}{\hbar k_x \varepsilon_{\mathbf{k}}}$ （其中  $x$  为自旋输运的方向）。该进动频率会导致输运过程中的非均匀扩展，从而在有散射存在的情况下导致输运过程中不可逆的自旋弛豫。促使我们做这个研究的是 Appelbaum 等人在体 Si 中的自旋输运实验 [63]。在体 Si 中，同样不存在 DP 的自旋弛豫机制。但是在他们的实验中存在与自旋输运方向和注入的自旋极化方向均垂直的静磁场。实验结果表明，在磁场还不是那么强的时候，自旋的注入长度就已经非常小了。典型地，在 0.1 T 的磁场下，自旋注入长度为几个  $\mu\text{m}$ 。Appelbaum 等人利用 Hanle 效应解释所观察到的实验现象。实际上，从微观的角度出发，这种磁场存在时输运过程中的自旋弛豫就是上面所指出的机制导致的。该机制已经被 Wu 等人从基于动力学自旋 Bloch 方程的微观方法预言过，最早可追溯到 2002 年 [274]。这一章中我们借助于动力学自旋 Bloch 方程，较为系统地在低温下的对称 Si 量子阱中研究这种输运过程中的自旋弛豫机制。

## 6.2 模型

我们考察沿着  $z$ ||[001] 方向生长的  $n$ -型对称 Si/SiGe 量子阱。在体 Si 中，导带的最低处位于布里渊区的  $X$  点附近，形成了六个简并的能谷。在沿  $z$ ||[001] 方向加了约束的量子阱中，由于电子纵向（[001] 方向）的有效质量大于横向的有效质量，使得两个简并的  $X_z$  能谷处的最低子带低于  $X_x$  和  $X_y$  处的最低子带。在我们的研究中，阱宽取为 5 nm，温度低于 80 K。在适度的电子浓度下，只有  $X_z$  能谷的最低子带被占据。具有极化度  $P$  的自旋从样品的一端（ $x = 0$  平面）注入，然后沿着  $x$  方向扩散。外加的磁场  $\mathbf{B}$  沿着  $y$  轴。

动力学自旋 Bloch 方程在章节 4.1 中已经给出。只不过现在自旋进动项里没有了动量依赖的有效磁场，只有静磁场。同时，由于两个谷的简并性，涉及多谷的动力学自旋 Bloch 方程可以约化为对“单个”能谷的方程，但是同时包含了谷内散射和谷间散射：

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial t} = & -\frac{e}{\hbar} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial k_x} - \frac{\hbar k_x}{m_t} \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial x} - \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{g\mu_B B \sigma_y}{2} + \Sigma_{\mathbf{k}}(x, t), \rho_{\mathbf{k}}(x, t) \right] \\ & + \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{intra}} + \left. \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x, t)}{\partial t} \right|_{\text{scat}}^{\text{inter}}. \end{aligned} \quad (6.1)$$

其中  $m_t \approx 0.196m_0$  是电子在  $x$ - $y$  平面内的有效质量， $g \approx 2$  为电子的有效 Landau 因子。 $\Psi(x, t)$  是满足泊松方程的电势， $\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = e[n(x, t) - N_0]/(\varepsilon_0 \kappa_0 a)$ 。其中  $n(x, t)$  代表时刻  $t$  位置  $x$  处的电子浓度， $N_0$  是背景正电荷浓度。初态时给定  $n(x, 0) = N_0$ 。 $\kappa_0 = 11.9$  是电子的相对静态介电常数 [567]。谷内电声散射包含由纵向声学声子 (LA) 和横向声学声子 (TA) 的贡献，而谷间电声散射是  $g$  型的散射，涉及到 LA、TA 和纵向光学声子 (LO) [568]。但是由于低温的因素，电子

—LO 声子的散射可以忽略。我们记  $M_{\alpha,\text{intra},\mathbf{Q}}^2 = \frac{\hbar D_\alpha^2 Q^2}{2d\Omega_{\alpha,\text{intra},\mathbf{Q}}} |I_{\text{intra}}(iq_z)|^2$  是谷内电声散射的矩阵元,  $M_{\alpha,\text{inter},\mathbf{Q}}^2 = \frac{\hbar \Delta_\alpha^2}{2d\Omega_{\alpha,\text{inter},\mathbf{Q}}} |I_{\text{inter}}(iq_z)|^2$  是谷间电声散射的矩阵元。  $\alpha = \text{LA/TA}$  代表了 LA/TA 的声子模。  $d = 2.33 \text{ g/cm}^3$  是 Si 的密度 [569]。  $D_{\text{LA}} = 6.39 \text{ eV}$ ,  $D_{\text{TA}} = 3.01 \text{ eV}$  [568]。  $\Omega_{\alpha,\text{intra},\mathbf{Q}} = v_\alpha Q$ , 其中声速  $v_{\text{LA}} = 9.01 \times 10^5 \text{ cm/s}$  和  $v_{\text{TA}} = 5.23 \times 10^5 \text{ cm/s}$  [568]。  $\Delta_{\text{LA}} = 1.5 \times 10^8 \text{ eV/cm}$ ,  $\Delta_{\text{TA}} = 0.3 \times 10^8 \text{ eV/cm}$  [568]。 谷间散射涉及的声子能量近似固定在  $\hbar\Omega_{\text{LA},\text{inter},\mathbf{Q}} = 0.019 \text{ eV}$  以及  $\hbar\Omega_{\text{TA},\text{inter},\mathbf{Q}} = 0.01 \text{ eV}$  [568]。  $|I_\gamma(iq_z)|^2 = \frac{\pi^4 \sin^2 y}{y^2(y^2 - \pi^2)^2}$  ( $\gamma = \text{intra/inter}$ ) 是形状因子, 对于谷间散射  $y \equiv aq_z/2$ , 对于谷内散射  $y \equiv a(q_z - 2K_{X_z}^z)/2$ 。 这里  $K_{X_z}^z = 0.85 \times \frac{2\pi}{a_0}$  (其中  $a_0$  是 Si 的晶格常数) 是  $X_z$  谷底相对  $\Gamma$  点的位置。

### 6.3 只有弹性散射时的解析研究

在严格的数值解动力学自旋 Bloch 方程之前, 我们先考虑只有弹性的电子—杂质散射时的稳态解析解。 通过这个稳态的解析解, 可以初步得到自旋输运的一些性质。 在解析研究时不考虑 Hartree—Fock 自能以及由于空间电荷密度涨落导致的内建电场。 在稳态时, 密度矩阵对动量的极角  $\theta_{\mathbf{k}}$  的傅立叶变化分量,  $\rho_{\mathbf{k}}^l(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(x) e^{-il\theta_{\mathbf{k}}}$ , 满足方程

$$\frac{\hbar k}{2m_t} \frac{\partial}{\partial x} [\rho_{\mathbf{k}}^{l+1}(x) + \rho_{\mathbf{k}}^{l-1}(x)] = -i \frac{g\mu_B B}{2\hbar} [\sigma_y, \rho_{\mathbf{k}}^l(x)] - \frac{\rho_{\mathbf{k}}^l(x)}{\tau_{\mathbf{k}}^l}, \quad (6.2)$$

这里  $\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}^l} = \frac{m^* N_i}{2\pi\hbar^3} \int_0^{2\pi} d\theta (1 - \cos l\theta) U_{\mathbf{q}}^2$  是  $l$  阶的动量弛豫率。  $U_{\mathbf{q}}^2$  是电子—杂质散射矩阵元, 其中  $|\mathbf{q}| = \sqrt{2k^2(1 - \cos\theta)}$ 。  $N_i$  代表杂质浓度。 忽略  $\rho_{\mathbf{k}}^l$  的  $|l| > 1$  的高阶项, 可以得到关于  $\rho_{\mathbf{k}}^{\pm 1}$  和  $\rho_{\mathbf{k}}^0$  的封闭的一阶微分方程组, 并由此得到关于  $\rho_{\mathbf{k}}^0$  的二阶微分方程:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho_{\mathbf{k}}^0(x) = -2 \left( \frac{m_t g \mu_B B}{2\hbar^2 k} \right)^2 [\sigma_y, [\sigma_y, \rho_{\mathbf{k}}^0(x)]] + \frac{i g \mu_B B}{\hbar \tau_{\mathbf{k}}^1} \left( \frac{m_t}{\hbar k} \right)^2 [\sigma_y, \rho_{\mathbf{k}}^0(x)]. \quad (6.3)$$

定义自旋矢量  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}^0(x) = \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}^0(x) \boldsymbol{\sigma}]$ , 并且利用边界条件 (i)  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}^0(0) = (0, 0, S_{k_z}^0)^T$  和 (ii)  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}^0(+\infty) = 0$ , 可以解得

$$\mathbf{S}_{\mathbf{k}}^0(x) = S_{k_z}^0 \begin{pmatrix} \sin \left[ \frac{m_t}{\hbar k \tau_{\mathbf{k}}^1} \left( \sqrt{1 + \frac{1}{(\tau_{\mathbf{k}}^1 \omega_p)^2}} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}} x \right] \\ 0 \\ \cos \left[ \frac{m_t}{\hbar k \tau_{\mathbf{k}}^1} \left( \sqrt{1 + \frac{1}{(\tau_{\mathbf{k}}^1 \omega_p)^2}} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}} x \right] \end{pmatrix} e^{-\frac{m_t \omega_p}{\hbar k} \left( \sqrt{1 + \frac{1}{(\tau_{\mathbf{k}}^1 \omega_p)^2}} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} x}, \quad (6.4)$$

其中  $\omega_p = g\mu_B B/\hbar$  是时间域的自旋进动频率。 考虑到两个能谷, 在  $z$  方向的总的自旋极化为  $S_z(x) = 2 \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(x) \sigma_z] = \int_0^{+\infty} \frac{dk}{\pi} k S_{k_z}^0(x)$ 。 当系统处于简并区时,  $S_{k_z}^0$  在费米

面附近最大，因此费米面附近的态对  $S_z(x)$  的贡献最大。

从方程 (6.4) 可以看出，在自旋的扩散过程中， $\mathbf{S}_k^0(x)$  一方面绕着磁场进动，另一方面在幅度上衰减。但是，在无散射的情况下当  $\tau_k^1$  变得无穷长时，方程 (6.4) 变为  $\mathbf{S}_k^0(x) = S_{kz}^0 \left( \sin \frac{\sqrt{2}m_t\omega_p}{\hbar k} x, 0, \cos \frac{\sqrt{2}m_t\omega_p}{\hbar k} x \right)^T$ 。该结果清楚的表明在磁场存在时，空间域动量依赖的自旋进动导致非均匀扩展 [274]。该非均匀扩展本身只会导致自旋极化  $S_z(x)$  沿  $x$  方向的可逆的衰减。然而，当有散射存在时，这个衰减变为不可逆的，正如方程 (6.4) 中的指数衰减项所体现的那样。所以，即使没有 DP 的自旋弛豫机制，伴随着自旋的扩散仍然有自旋弛豫。注意到方程 (6.4) 中指数项里的衰减速率随着  $1/\tau_p^1$  和  $\omega_p$  的增大而增大，表明自旋的扩散受散射和磁场的抑制。在我们的解析研究中，只考虑弹性的电子-杂质散射。为了得到在该量子阱系统中自旋扩散的完整图像，我们将电子-声子和电子-电子散射包含进来，从数值上完整的求解动力学自旋 Bloch 方程。

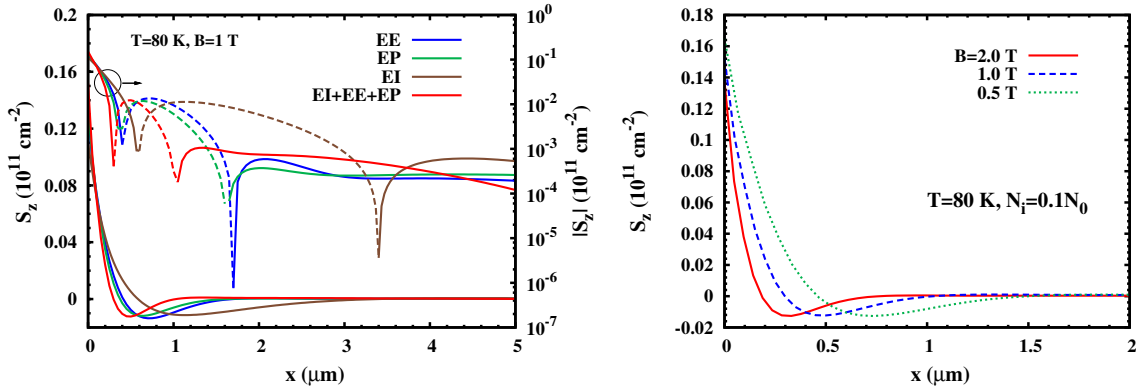


图 6-1: 左图: 在包含不同散射的情形下, 稳态的  $S_z$  在  $x$  方向的分布。标注着“EE”, “EP” 或者“EI”的曲线分别代表了包含了电子-电子、电子-声子或者电子-杂质散射时的计算结果。标注着“EI+EE+EP”的曲线来自包含所有散射的计算。同时, 我们还将  $S_z$  的绝对值随着  $x$  的依赖画在了图中 (画在对数刻度, 见图的右手边框)。图中虚线部分对应  $S_z < 0$ 。  $T = 80$  K,  $B = 1$  T。右图: 在不同的磁场强度下, 稳态的  $S_z$  随着  $x$  的依赖。  $T = 80$  K,  $N_i = 0.1N_0$ 。

## 6.4 数值结果

我们利用双边注入的边界条件 [11, 276, 493, 570] 数值的求解动力学的自旋 Bloch 方程, 从而得到空间的自旋极化分布  $S_z(x) = N_{1/2}(x) - N_{-1/2}(x)$ , 其中  $N_\sigma(x) = n_\sigma(x, +\infty) = 2 \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}, \sigma}(x, +\infty)$  (因子 2 来源于两个简并的谷)。在计算中, 若非特别说明, 我们取定  $N_0 = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。在考虑进杂质时, 我们取  $N_i = 0.1N_0$ 。我们研究了散射, 磁场和电子浓度对自旋扩散的影响, 主要结果呈现在图 6-1 和 6-2 中。

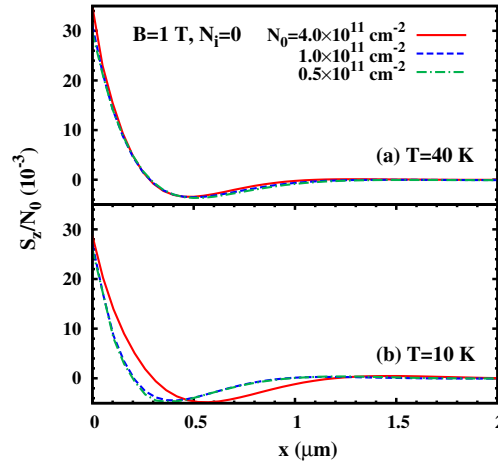


图 6-2: 不同电子浓度时, 稳态下  $S_z/N_0$  随  $x$  的依赖。(a):  $T = 40$  K; (b):  $T = 10$  K。  $B = 1$  T,  $N_i = 0$ 。

我们首先研究了散射和磁场对自旋扩散的影响。在图 6-1 左图中, 我们画出了在包含不同的散射的情况下得到的稳态的自旋极化在空间的分布。为了清楚的呈现自旋扩散的性质, 我们同时也画出了  $S_z$  的绝对值 (对数坐标系下, 见图的手边框上的尺度) 随着  $x$  的依赖。所有的曲线清楚表明在没有 DP 弛豫机制的情况下, 伴随着扩散仍然有自旋的弛豫, 从而导致  $\mu\text{m}$  量级的自旋扩散长度。对比标注为“EE”和“EI”的曲线, 可以发现, 库仑散射可以非常有效地压制自旋的扩散。事实上, 以前的研究表明, 库仑散射在时间域的自旋弛豫 [11, 281, 571] 和空间域的自旋输运 [275, 276, 493] 中都非常重要。与时间域的强 (弱) 散射条件下, 增强散射会抑制非均匀扩展 (提供弛豫通道), 从而使得弛豫时间变长 (短) 不一样, 这里库仑散射通过减小有效的动量散射时间  $\tau_k$  (将  $\tau_k$  修正为  $\tau_k^*$ ) 来压制自旋的扩散。类似地, 其它散射如电子-声子散射 (包括谷内和谷间的贡献), 也会贡献动量的弛豫从而压制自旋扩散, 正如图中标注为“EP”的曲线表明的那样。对于所有散射都考虑进来因而散射最强的情况, 自旋扩散长度变得非常小。同时我们还注意到, 由于散射变强, 自旋极化在空间的进动周期也变短。这是由于自旋在实空间的进动频率随着  $1/\tau_k^1$  的增大而增大 [如方程 (6.4) 所示]。我们进一步研究了磁场对自旋扩散的影响。结果画在图 6-1 右图中。该图表明, 随着磁场的增强, 自旋扩散长度和自旋进动周期都减小。这和解析解 (6.4) 是一致的。该方程中的指数衰减速率和进动频率都随着  $\omega_p$  的增大而变大。以上的研究表明了散射和磁场对自旋扩散的抑制。

我们还研究了自旋扩散对电子浓度的依赖。在温度  $T = 40$  和  $10$  K 的情形下 [分别对应于图 6-2(a) 和 (b)], 我们画出了三种不同电子浓度下稳态自旋极化  $S_z/N_0$  的空间分布。从图 6-2(a) 我们发现, 在  $T = 40$  K 时, 自旋的扩散对浓度的依赖不敏感。这是由于电子具有大的阱平面内的有效质量, 即使在  $40$  K 的温度, 我们所研究的三种浓度

仍旧处在非简并区。在这个区域，电子的分布近似为 Boltzmann 分布，非均匀扩展对浓度不敏感。但是，当温度降低到 10 K 时，如图 6-2(b) 所示，浓度的影响显现出来。此时，在大的浓度下如  $N_0 = 4.0 \times 10^{11}$ ，二维电子系统开始进入简并区，自旋的注入长度随浓度增大而增大（对比  $N_0 = 4.0 \times 10^{11}$  和  $N_0 = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  两种情形）。这主要是因为，在简并区，自旋的衰减速率随着  $k_f$  的增大而减小 [参见方程 (6.4) 中的指数项]。与此同时，对于低的浓度，比如  $N_0 = 1.0 \times 10^{11}$  和  $0.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  的情形，电子仍是非简并的，所以自旋的扩散对浓度仍旧不敏感。

## 6.5 小结

在这一章，我们研究了低温下对称 Si/SiGe (001) 量子阱中的自旋扩散。由于没有 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合，在该量子阱系统中不存在时间域里的 DP 自旋弛豫机制。即使施加一个外磁场，时间域里的自旋弛豫时间也是无穷长。但是，即使如此，在运输的过程中，将伴随着自旋的弛豫。这个自旋弛豫是由实空间运输过程中动量依赖的自旋进动频率产生的非均匀扩展和散射一道导致的。我们考察了散射，磁场和电子浓度对自旋运输的影响。我们的研究表明，散射和磁场对自旋的扩散起压制的作用。最后，我们的研究还表明在电子系统处于非简并区时，自旋的扩散对电子的浓度不敏感；但是，当电子系统进入简并区时，增大电子浓度会促进自旋的扩散。

## 第七章 石墨烯中的自旋弛豫

在第 3 章我们介绍了当前关于石墨烯中自旋弛豫的研究现状。这一章介绍我们自己在这方面的研究工作。首先，我们研究了附着原子存在下随机 Rashba 场导致的自旋弛豫。我们考虑和比较了 DP 机制和随机 Rashba 场的涨落导致的自旋翻转散射机制，并对几个组的实验结果进行了拟合，希望确定在这几个实验中占主导地位的自旋弛豫机制。然后，我们研究了低迁移率的波纹状石墨烯中的自旋弛豫。这种波纹状的结构弯曲不仅导致 Rashba 型的自旋轨道耦合，还导致额外的类 Zeeman 项的自旋轨道耦合 [319]。这个类 Zeeman 项在  $\mathbf{K}$  和  $\mathbf{K}'$  能谷中具有相反的符号，从而提供谷间的非均匀扩展。我们揭示并研究了这种谷间的非均匀扩展连同谷间散射导致的自旋弛豫机制。

### 7.1 石墨烯中随机 Rashba 自旋轨道耦合导致的自旋弛豫：D'yakonov-Perel' 和类 Elliott-Yafet 自旋弛豫机制的比较

这一节我们研究石墨烯中由附着原子和衬底导致的随机 Rashba 场下的自旋弛豫。我们建立了一个随机 Rashba 场的模型。在这个模型中，带电的附着原子一方面局部地增强 Rashba 自旋轨道耦合，另一方面提供库仑势散射中心。这两个效应都贡献到 DP 的自旋弛豫机制。此外，随机 Rashba 场的涨落还能导致自旋翻转散射。我们发现，随着随机附着原子浓度的增大，由随机 Rashba 场的涨落导致的自旋翻转散射表现出类 EY 机制所具有的行为，即自旋弛豫率和动量弛豫率成正比。但是，DP 机制则既可以体现出常规的 DP 行为（强散射区自旋弛豫率和动量弛豫率成反比），又可以显现出类 EY 的行为。这两个机制都对随机 Rashba 场的关联长度敏感，而这个关联长度是对环境参量比如电子浓度，附着原子浓度和温度依赖的。在实验上，Groningen 的小组 [285] 和 Riverside 的小组 [286, 287] 的实验有的体现常规 DP 机制的行为，而有的体现类 EY 机制的行为。此外，Jo 等人还观察到自旋弛豫时间随扩散系数的非单调的依赖性质 [288]。通过拟合和比较这些实验，我们发现，如果不考虑 Riverside 组 Pi 等人的实验 [286]，则 DP 机制和随机 Rashba 场导致的自旋翻转散射机制都有可能是主导的自旋弛豫机制。但是，如果要将早期的这些不同组的实验统一地解释，DP 机制是合理的选择。

### 7.1.1 模型

SiO<sub>2</sub> 衬底上的  $n$  型掺杂石墨烯的随机 Rashba 自旋轨道耦合为 [164, 377]

$$H_{\text{so}} = \lambda(\mathbf{r})(\mu\sigma_x s_y - \sigma_y s_x). \quad (7.1)$$

这里  $\mu = \pm 1$  标记  $\mathbf{K}$  和  $\mathbf{K}'$  能谷,  $\boldsymbol{\sigma}$  和  $\mathbf{s}$  分别是赝自旋空间和自旋空间的 Pauli 矩阵。我们采用如下的模型模拟由随机分布的附着原子和衬底导致的位置依赖的自旋轨道耦合的系数,

$$\lambda(\mathbf{r}) = \lambda_0^i + \sum_{n=1}^{N_i^a} \delta_n e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{R}_n|^2/2\xi^2}. \quad (7.2)$$

这里第二项由总数为  $N_i^a$  的随机附着原子贡献。在这个模型中, 我们假设位于  $\mathbf{R}_n$  的附着原子导致局域的 Rashba 场, 其峰值为  $\delta_n$ , 处在  $\mathbf{R}_n$  位置, 以高斯形式在  $\xi$  的尺度内衰减。 $\delta_n$  在 meV 的量级 [315–317],  $\xi$  大于石墨烯的晶格常数 0.25 nm [315]。第一项  $\lambda_0^i$  来自衬底的平均的贡献, 它的涨落被囊括进对  $\xi$  的影响上。 $\lambda(\mathbf{r})$  的平均值为  $\lambda_0 \equiv \langle \lambda(\mathbf{r}) \rangle = \lambda_0^i + \lambda_0^a$ , 这里  $\lambda_0^a = 2\pi n_i^a \bar{\delta} \xi^2$ , 而  $n_i^a$  是附着原子的面浓度。关联函数  $C(\mathbf{r}) \equiv \langle [\lambda(\mathbf{r}) - \lambda_0][\lambda(0) - \lambda_0] \rangle = \pi n_i^a \bar{\delta}^2 \xi^2 e^{-r^2/4\xi^2}$ , 其傅立叶变换为

$$C_{\mathbf{q}} = 4\pi^2 n_i^a \bar{\delta}^2 \xi^4 e^{-\xi^2 q^2}. \quad (7.3)$$

这个形式和文献 [269] 中所给的一样, 只不过对  $\xi$  有更高阶的依赖。对于单边吸附的情形 (附着原子分布在石墨烯的单侧, 比如与空气接触的表面), 我们选择  $\delta_n = \delta$ , 因而有  $\bar{\delta} = \delta$  以及  $\bar{\delta}^2 = \delta^2$ 。而对于双边吸附的情形 (附着原子分布在石墨烯的表面和石墨烯/衬底的界面), 我们设  $\delta_n = \delta_1$  或者  $\delta_2$  ( $\delta_1 \delta_2 < 0$ ), 满足等概率分布, 因而  $\bar{\delta} = 0.5(\delta_1 + \delta_2)$  以及  $\bar{\delta}^2 = 0.5(\delta_1^2 + \delta_2^2)$ 。注意到这里给出的随机 Rashba 模型由描述石墨烯中电子空穴坑 (electron-hole puddle) 的随机短程势的模型变化而来 [572]。

在章节 2.2.3 所给出的基下, 电子系统的有效哈密顿量为 [246]

$$H = \sum_{\mu\mathbf{k}ss'} [\varepsilon_{\mathbf{k}} \delta_{ss'} + \boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{s}_{ss'}] c_{\mu\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mu\mathbf{k}s'} + H_{\text{int}}. \quad (7.4)$$

这里  $c_{\mu\mathbf{k}s}$  ( $c_{\mu\mathbf{k}s}^\dagger$ ) 是  $\mu$  谷里相对谷底具有动量  $\mathbf{k}$  和自旋  $s$  ( $s = \pm \frac{1}{2}$ ) 的电子的湮灭 (产生) 算符。 $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar v_f k$  且  $v_f = 10^6$  m/s [140, 378, 380]。由空间平均的 Rashba 场贡献的有效磁场为 (参考前面的章节 2.2.3)

$$\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}} = \lambda_0 (-\sin \theta_{\mathbf{k}}, \cos \theta_{\mathbf{k}}, 0), \quad (7.5)$$

这里  $\theta_{\mathbf{k}}$  是动量  $\mathbf{k}$  的幅角。相互作用哈密顿量  $H_{\text{int}}$  包含自旋守恒的散射 [电子-杂质散射 [573] (这里杂质包含衬底中的杂质和带电的附着原子 [286, 574], 利用 Adam 和 Das



Sarma 提出的最小模型考虑进来 [573])，电子-声子散射 [575-577] 以及电子-电子库仑散射 [246] 和由随机 Rashba 场的涨落导致的自旋翻转散射 [252, 269]，

$$H_{\text{flip}} = \sum_{\mu, \mathbf{k}' \neq \mathbf{k}, ss'} \lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'ss'} C_{\mu\mathbf{k}s}^\dagger C_{\mu\mathbf{k}'s'}, \quad (7.6)$$

其中

$$\lambda_{\mathbf{q}} = \int \lambda(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (7.7)$$

以及

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \\ ie^{i\theta_{\mathbf{k}'}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.8)$$

包含进自旋翻转散射的动力学自旋 Bloch 方程为

$$\partial_t \rho_{\mu\mathbf{k}}(t) = \partial_t \rho_{\mu\mathbf{k}}(t)|_{\text{coh}} + \partial_t \rho_{\mu\mathbf{k}}(t)|_{\text{scat}}^c + \partial_t \rho_{\mu\mathbf{k}}(t)|_{\text{scat}}^f. \quad (7.9)$$

自旋守恒散射  $\partial_t \rho_{\mu\mathbf{k}}(t)|_{\text{scat}}^c$  的具体表达式可以参考文献 [246]<sup>①</sup>。当电子的平均自由程比随机涨落的 Rashba 场的关联长度  $\xi$  大很多时（这个条件很容易满足，因为石墨烯中  $\xi \sim \text{nm}$  而  $l \sim 10-100 \text{ nm}$ ），也即，运动的电子确实感受到随机的 Rashba 场，自旋翻转散射可以写为 [252, 269]

$$\partial_t \rho_{\mu\mathbf{k}}(t)|_{\text{scat}}^f = -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_{\mu\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mu\mathbf{k}'}) [\rho_{\mu\mathbf{k}}(t) - V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \rho_{\mu\mathbf{k}'}(t) V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}]. \quad (7.10)$$

通过求解动力学的自旋 Bloch 方程，我们从  $\rho_{\mu\mathbf{k}}(t)$  的时间演化中得到自旋弛豫的信息。

### 7.1.2 只有弹性散射时的解析研究

我们首先从解析上研究在随机 Rashba 场下石墨烯中的自旋弛豫。为了实现这一点，我们只考虑进自旋翻转的散射和强的电子杂质散射。由于两个谷的简并，忽略掉谷

<sup>①</sup>文献 [246] 中附录部分给出的电子-光学声子散射的矩阵元有误，乘上 2 倍后是正确的形式，即  $|M_{\mu\mathbf{k}, \mu'\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\text{OP}}| = \frac{A_\lambda}{\rho_m \omega_\lambda}$ 。本论文中关于石墨烯的研究都用了错误的矩阵元。对于本节和下一章的研究，这个错误导致的影响可以忽略，因为重要的散射是电子-杂质散射。对于本章下一节 7.2 的研究，这个错误会有影响，因为那里正是谷间的电子-光学声子散射有效的导致自旋弛豫。对于这一点我们会在下一节进行说明。

指标, 动力学自旋 Bloch 方程简化为

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{\mathbf{k}}(t) = & -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{s}, \rho_{\mathbf{k}}(t)] - \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} |U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) [\rho_{\mathbf{k}}(t) - \rho_{\mathbf{k}'}(t)] \\ & - \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) [\rho_{\mathbf{k}}(t) - V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}'}(t) V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}]. \end{aligned} \quad (7.11)$$

这里  $|U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2$  是电子杂质的散射矩阵元,  $I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{2}[1 + \cos(\theta_{\mathbf{k}} - \theta_{\mathbf{k}'})]$  是形状因子 [246]。  $|U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 = n_i^a |U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^a|^2 + n_i^s |U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^s|^2$ , 其中第一项 (第二项) 对应于电子被附着原子 (衬底里的杂质) 的散射。  $|U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^s|^2$  是电子杂质散射的矩阵元 [246, 450, 573]。  $n_i^s$  是衬底中杂质的浓度。 定义自旋矢量  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(t) = \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(t)\mathbf{s}]$ , 我们可以从方程 (7.11) 直接得到  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(t)$  满足的方程

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{S}_{\mathbf{k}}(t) = & \frac{2\lambda_0}{\hbar} \mathbf{A}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}}(t) - \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} |U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) [\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(t) - \mathbf{S}_{\mathbf{k}'}(t)] \\ & - \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) [\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(t) - \mathbf{B}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}'}(t)]. \end{aligned} \quad (7.12)$$

这里

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cos \theta_{\mathbf{k}} \\ 0 & 0 & \sin \theta_{\mathbf{k}} \\ -\cos \theta_{\mathbf{k}} & -\sin \theta_{\mathbf{k}} & 0 \end{pmatrix} \quad (7.13)$$

以及

$$\mathbf{B}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{pmatrix} -\cos(\theta_{\mathbf{k}} + \theta_{\mathbf{k}'}) & -\sin(\theta_{\mathbf{k}} + \theta_{\mathbf{k}'}) & 0 \\ -\sin(\theta_{\mathbf{k}} + \theta_{\mathbf{k}'}) & \cos(\theta_{\mathbf{k}} + \theta_{\mathbf{k}'}) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.14)$$

对  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(t)$  做傅立叶展开  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(t) = \sum_l \mathbf{S}_{\mathbf{k}}^l(t) e^{il\theta_{\mathbf{k}}}$ , 我们从方程 (7.12) 得到关于  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}^l(t)$  的微分方程组

$$\partial_t S_{kx}^l(t) = \frac{\lambda_0}{\hbar} \sum_{l_0=\pm 1} S_{kz}^{l+l_0}(t) - \left(\frac{1}{\tau_k^l} + \frac{1}{\tau_{ks}^0}\right) S_{kx}^l(t) - \sum_{l_0=\pm 1} \frac{S_{kx}^{l+2l_0}(t) + i^{l_0} S_{ky}^{l+2l_0}(t)}{2\tau_{ks}^{l+l_0}}, \quad (7.15)$$

$$\partial_t S_{ky}^l(t) = \frac{\lambda_0}{\hbar} \sum_{l_0=\pm 1} i^{l_0} S_{kz}^{l+l_0}(t) - \left(\frac{1}{\tau_k^l} + \frac{1}{\tau_{ks}^0}\right) S_{ky}^l(t) - \sum_{l_0=\pm 1} \frac{i^{l_0} S_{kx}^{l+2l_0}(t) - S_{ky}^{l+2l_0}(t)}{2\tau_{ks}^{l+l_0}}, \quad (7.16)$$

$$\partial_t S_{kz}^l(t) = -\frac{\lambda_0}{\hbar} \sum_{l_0=\pm 1} [S_{kx}^{l+l_0}(t) + i^{l_0} S_{ky}^{l+l_0}(t)] - \left(\frac{1}{\tau_k^l} + \frac{2}{\tau_{ks}^0}\right) S_{kz}^l(t), \quad (7.17)$$

其中

$$\frac{1}{\tau_k^l} = \frac{k}{4\pi\hbar^2 v_f} \int_0^{2\pi} d\theta |U_{\mathbf{q}}|^2 (1 + \cos\theta)(1 - \cos l\theta), \quad (7.18)$$

以及

$$\frac{1}{\tau_{ks}^l} = \frac{k}{2\pi\hbar^2 v_f} \int_0^{2\pi} d\theta C_{\mathbf{q}} \cos l\theta. \quad (7.19)$$

这里  $|U_{\mathbf{q}}|^2$  和  $C_{\mathbf{q}}$  只依赖于  $|\mathbf{q}| = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ 。注意到  $\frac{1}{\tau_k^l} = \frac{1}{\tau_k^{-l}}$  以及  $\frac{1}{\tau_{ks}^l} = \frac{1}{\tau_{ks}^{-l}}$ 。同时，我们还注意到  $\frac{1}{\tau_k^0} = 0$  以及  $\tau_k^1$  实际上是电子杂质散射贡献的动量弛豫时间。

保留方程 (7.15)-(7.17) 中  $\mathbf{S}_k^l(t)$  中  $l = 0, \pm 1$  的最低三阶，我们有

$$\left[ \partial_t - \begin{pmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ -\mathbf{P}^\dagger & \mathbf{G} & \mathbf{P} \\ \mathbf{Q}^\dagger & -\mathbf{P}^\dagger & \mathbf{F} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \mathbf{S}_k^1 \\ \mathbf{S}_k^0 \\ \mathbf{S}_k^{-1} \end{pmatrix} = 0, \quad (7.20)$$

其中

$$\mathbf{G} = -\frac{1}{\tau_{ks}^0} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \mathbf{G} - \frac{1}{\tau_k^1}, \mathbf{P} = \frac{\lambda_0}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -i \\ -1 & i & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{Q} = \frac{1}{2\tau_{ks}^0} \begin{pmatrix} -1 & i & 0 \\ i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.21)$$

由于自旋翻转率  $1/\tau_{ks}^0$  比动量弛豫率  $1/\tau_k^1$  小很多（在石墨烯中， $1/\tau_k^1$  通常在  $10 \text{ ps}^{-1}$  的量级。即使  $1/\tau_{ks}^0$  达到实验的值  $\sim 0.01 \text{ ps}^{-1}$ ， $\tau_k^1/\tau_{ks}^0$  仍旧小至  $10^{-3}$ ）以及在强散射极限下和  $\mathbf{S}_k^0$  比起来  $\mathbf{S}_k^{\pm 1}$  是小量，我们可以近似  $\mathbf{F}$  和  $\mathbf{Q}$  为  $\mathbf{F} \approx -\frac{1}{\tau_k^1}$  以及  $\mathbf{Q} \approx 0$ 。利用初始条件  $\mathbf{S}_k^l(0) = \delta_{l0}(0, 0, S_{kz}^0(0))^T$  ( $l = 0, \pm 1$ )，方程 (7.20) 解得  $[\mathbf{S}_k^{\pm 1}(t)]$  的解不是我们关心的，因而这里不给出]

$$\mathbf{S}_k^0(t) = \frac{1}{2} \left[ \left( 1 + \frac{1}{\sqrt{1-c_z^2}} \right) e^{-\Gamma_z^+ t} + \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1-c_z^2}} \right) e^{-\Gamma_z^- t} \right] (0, 0, S_{kz}^0(0))^T, \quad (7.22)$$

其中

$$c_z = \frac{4\lambda_0}{\hbar} \frac{1}{1/\tau_k^1 - 1/\tau_{ks}^0}, \Gamma_z^\pm = \frac{1}{\tau_{ks}^0} + \frac{1}{2\tau_k^1} \pm \left( \frac{1}{\tau_{ks}^0} - \frac{1}{2\tau_k^1} \right) \sqrt{1-c_z^2}. \quad (7.23)$$

在强散射极限下  $c_z \ll 1$ ， $S_{kz}^0(t) \approx S_{kz}^0(0) e^{-\Gamma_z^+ t}$ ，其中  $\Gamma_z^+ \approx 2/\tau_{ks}^0 + 4\lambda_0^2 \tau_k^1 / \hbar^2$ 。因而，我们得到

$$\mathbf{S}_k^0(t) = e^{-\Gamma_z^+ t} (0, 0, S_{kz}^0(0))^T, \quad (7.24)$$

其中

$$\Gamma_z = 2/\tau_{ks}^0 + 4\lambda_0^2\tau_k^1/\hbar^2, \quad (7.25)$$

$$\frac{1}{\tau_k^1} = \frac{k}{4\pi\hbar^2v_f} \int_0^{2\pi} d\theta |U_{\mathbf{q}}|^2 \sin^2 \theta, \quad (7.26)$$

$$\frac{1}{\tau_{ks}^0} = \frac{k}{2\pi\hbar^2v_f} \int_0^{2\pi} d\theta C_{\mathbf{q}}. \quad (7.27)$$

类似地, 分别在初始条件  $\mathbf{S}_k^l(0) = \delta_{l0}(S_{kx}^0(0), 0, 0)^T$  或者  $\mathbf{S}_k^l(0) = \delta_{l0}(0, S_{ky}^0(0), 0)^T$  下,  $\mathbf{S}_k^0(t)$  可以解得

$$\mathbf{S}_k^0(t) = e^{-\Gamma_x t} (S_{kx}^0(0), 0, 0)^T, \quad (7.28)$$

和

$$\mathbf{S}_k^0(t) = e^{-\Gamma_y t} (0, S_{ky}^0(0), 0)^T, \quad (7.29)$$

其中  $\Gamma_x = \Gamma_y = \Gamma_z/2$ 。对于石墨烯中高度简并的电子系统, 自旋弛豫由费米面附近自旋极化的电子贡献。因此, 在上面的自旋弛豫率的表达式中, 可以用费米动量  $k_f$  代替  $k$ 。

从方程 (7.25), 我们注意到自旋弛豫率包含两个部分, 一部分是由于自旋翻转散射贡献的  $\Gamma_{\text{flip}} = 2/\tau_{kfs}^0$ , 另一部分是 DP 机制导致的  $\Gamma_{\text{DP}} = 4\lambda_0^2\tau_k^1/\hbar^2$ 。这两种机制独立的贡献自旋弛豫。注意到这里得到的  $\Gamma_{\text{flip}}$  和文献 [269] 给出的结果是一致的, 除了关联函数的具体形式不一样。接下来我们分别讨论这两种机制导致的自旋弛豫, 并做一个比较。

### 7.1.2.1 随机 Rashba 场下自旋翻转散射导致的自旋弛豫

利用方程 (7.3), 我们可以得到自旋翻转散射导致的沿  $z$  轴的自旋弛豫率为

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{flip}} &= \frac{k_f}{\pi\hbar^2v_f} \int_0^{2\pi} d\theta C_{\mathbf{q}} = \frac{8\pi^2 n_i^a \bar{\delta}^2 \xi^4 k_f}{\hbar^2 v_f} e^{-2\xi^2 k_f^2} I_0(2\xi^2 k_f^2) \\ &= \frac{8\pi^2 n_i^a \bar{\delta}^2 \xi^3}{\hbar^2 v_f} F(\xi k_f) = \frac{8\pi^2 n_i^a \bar{\delta}^2 k_f^{-3}}{\hbar^2 v_f} G(\xi k_f). \end{aligned} \quad (7.30)$$

在极限  $k_f \xi \ll 1$  以及  $k_f \xi \gg 1$  下,

$$\Gamma_{\text{flip}} \approx \frac{8\pi^2 n_i^a \bar{\delta}^2}{\hbar^2 v_f} \begin{cases} \xi^4 k_f & (k_f \xi \ll 1) \\ \xi^3 / (2\sqrt{\pi}) & (k_f \xi \gg 1) \end{cases}. \quad (7.31)$$

在上面的方程中  $I_0(x)$  是修正 Bessel 函数,  $F(x) = xe^{-2x^2}I_0(2x^2)$  以及  $G(x) = x^3F(x)$ 。

我们考察影响  $\Gamma_{\text{flip}}$  的各种因素。 $\Gamma_{\text{flip}}$  和随机附着原子浓度  $n_i^a$  成正比。从图 7-1 所示的  $F(x)$  和  $G(x)$  对  $x$  的依赖, 我们可以得到  $\Gamma_{\text{flip}}$  对  $k_f$  和  $\xi$  的依赖。随着  $k_f$  的增大,  $\Gamma_{\text{flip}}$  首先在  $k_f\xi \leq 0.63$  的区域几乎线性增大, 之后开始缓慢的下降并最终达到饱和值 [ $F(+\infty) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$ ]。因而, 随着电子浓度  $n_e$  的增大,  $\Gamma_{\text{flip}}$  具有非单调的行为, 而且在  $n_e^c = \frac{1}{\pi}(\frac{0.63}{\xi})^2$  位置具有一个峰。当  $n_e \ll n_e^c$  时,  $\Gamma_{\text{flip}}$  与  $n_e^{1/2}$  成正比; 当  $n_e \gg n_e^c$  时,  $\Gamma_{\text{flip}}$  对  $n_e$  不敏感。这些性质和文献 [269] 中呈现的结果一致。这里我们对  $n_e^c$  给一个估计。当随机 Rashba 场的关联长度  $\xi$  取为 1 nm 时,  $n_e^c \approx 1.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , 和实验比起来这是一个非常高的值。通常  $n_e$  在  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  左右变化。因此, 为了观察到  $\Gamma_{\text{flip}}$  随  $n_e$  增大的非单调行为,  $\xi$  必须在一个较大的值附近, 如 3.5 nm。当电子浓度固定时,  $\Gamma_{\text{flip}}$  随着  $\xi$  单调上升, 如图 7-1 所展示的  $G(x)$  对  $x$  的依赖所表明的。温度  $T$  对  $\Gamma_{\text{flip}}$  的影响可以从  $\Gamma_{\text{flip}}$  的  $k$  依赖推断出来。对于高度简并的电子系统,  $\Gamma_{\text{flip}}$  对  $T$  不敏感。而当电子浓度较低时, 随着温度的上升,  $\Gamma_{\text{flip}}$  被期待缓慢上升, 因为电子会占据大的动量态。在典型参数  $\bar{\delta}^2 = 25 \text{ meV}^2$ ,  $n_i^a = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  和  $\xi = 0.5 \text{ nm}$  下, 我们有  $k_f\xi \approx 0.09$  以及  $\Gamma_{\text{flip}}^{-1} \approx 670 \text{ ps}$ 。如果  $\xi$  变为两倍, 即 1 nm, 则  $\Gamma_{\text{flip}}^{-1}$  变为原来的 1/16, 因为在  $k_f\xi \ll 1$  的条件下  $\Gamma_{\text{flip}} \propto \xi^4$  [方程 (7.31)]。

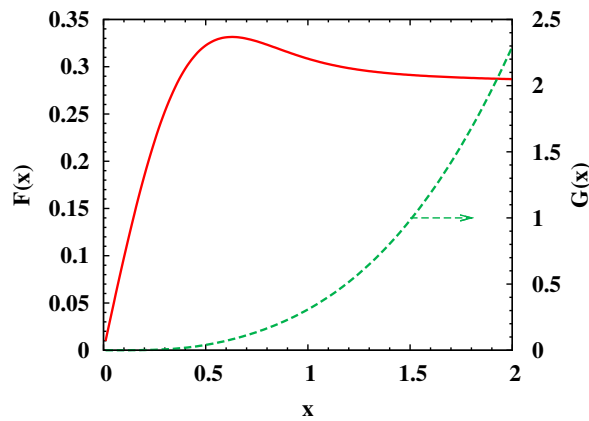


图 7-1: 方程 (7.30) 给出的  $F(x)$  和  $G(x)$ 。  $G(x)$  的刻度在图的右边。

### 7.1.2.2 DP 机制导致的自旋弛豫

在我们的解析研究中，只有弹性的自旋守恒的电子杂质散射被考虑。在其它自旋守恒散射也包含进来后，由 DP 机制导致的自旋弛豫率被修正为

$$\Gamma_{\text{DP}} = 4\lambda_0^2 \tau_p^*(k_f) / \hbar^2, \quad (7.32)$$

这里  $\tau_p^*(k_f)$  是由各种散射（包括库仑散射）导致的有效的动量弛豫时间 [11]。当  $\lambda_0$  固定时，电子浓度和温度通过  $\tau_p^*(k_f)$  影响自旋弛豫率  $\Gamma_{\text{DP}}$ 。在之前的研究 [246] 中发现，随着  $n_e$  的增大或者  $T$  的减小，散射强度会下降，使得  $\Gamma_{\text{DP}}$  增大。但是，当电子杂质散射主导时， $\Gamma_{\text{DP}}$  对温度  $T$  不敏感。 $\Gamma_{\text{DP}}$  对  $n_i^a$  的依赖不显然。为了分析的方便，我们记  $\tau_p^{-1}(k_f) = \tau_{p,i}^{-1}(k_f) + \tau_{p,a}^{-1}(k_f)$ ，这里  $\tau_{p,a}^{-1}(k_f)$  来自于电子一带电附着原子的散射，而  $\tau_{p,i}^{-1}(k_f)$  由其它所有的散射贡献。从方程 (7.26)，我们有

$$\tau_{p,a}^{-1}(k_f) = \frac{n_i^a k_f}{4\pi \hbar^2 v_f} \int_0^{2\pi} d\theta |U_{\mathbf{q}}^a|^2 \sin^2 \theta \equiv c_1 n_i^a, \quad (7.33)$$

这里  $|\mathbf{q}| = 2k_f \sin \frac{\theta}{2}$ 。我们记  $\lambda_0 = \lambda_0^i + 2\pi n_i^a \bar{\delta} \xi^2 \equiv \lambda_0^i + c_2 n_i^a$ ， $\Gamma_{\text{DP}}$  可以写为

$$\Gamma_{\text{DP}} = \frac{4}{\hbar^2} \frac{(\lambda_0^i + c_2 n_i^a)^2}{\tau_{p,i}^{-1}(k_f) + c_1 n_i^a}, \quad (7.34)$$

它对  $n_i^a$  具有复杂的依赖。当  $c_2 = 0$  和  $\lambda_0^i \neq 0$ 、 $c_2 > 0$  和  $0 \leq n_i^a \leq c_2^{-1} \lambda_0^i - 2c_1^{-1} \tau_{p,i}^{-1}(k_f)$  或者  $c_2 < 0$  以及  $0 \leq n_i^a \leq -c_2^{-1} \lambda_0^i$ ， $\Gamma_{\text{DP}}$  随着  $n_i^a$  的增大而变小，表现出常规的 DP 机制的行为。但是，十分有趣的是，当  $c_2 > 0$  和  $n_i^a \geq c_2^{-1} \lambda_0^i - 2c_1^{-1} \tau_{p,i}^{-1}(k_f)$  或者  $c_2 < 0$  以及  $n_i^a \geq -c_2^{-1} \lambda_0^i$ ， $\Gamma_{\text{DP}}$  随着  $n_i^a$  的增大而增大，表现出类 EY 机制的行为。特别地，在  $n_i^a$  足够大的极限，近似的有  $\Gamma_{\text{DP}} \propto n_i^a$ 。取典型值  $\lambda_0 = 0.2 \text{ meV}$  以及  $\tau_p^*(k_f) = 0.1 \text{ ps}$  [450]， $\Gamma_{\text{DP}}^{-1}$  大约在 100 ps。

### 7.1.2.3 随机 Rashba 场导致的自旋翻转散射和 DP 机制的比较

我们在  $k_f \xi \ll 1$  的条件下（石墨烯中的典型条件）比较随机 Rashba 场导致的自旋翻转散射和 DP 机制对自旋弛豫的贡献。在这个条件下，从方程 (7.31) 和 (7.34)，在  $\lambda_0^i = \tau_{p,i}^{-1}(k_f) = 0$  时我们得到  $\Gamma_{\text{DP}} / \Gamma_{\text{flip}} \approx 10 \bar{\delta}^2 / \bar{\delta}^2$ 。对于单边附着的情形， $\bar{\delta}^2 = \bar{\delta}^2$ ，因而  $\Gamma_{\text{DP}} / \Gamma_{\text{flip}} \approx 10$ ， $\Gamma_{\text{flip}}$  可以忽略。但是，对于双边附着的情形， $\Gamma_{\text{flip}}$  和  $\Gamma_{\text{DP}}$  可比甚至超过后者，因为  $\bar{\delta}$  可以小至零。在实际中  $\tau_{p,i}^{-1}(k_f) \neq 0$  而  $\Gamma_{\text{DP}}$  随着  $\tau_{p,i}^{-1}(k_f)$  的增大而减小。当衬底也贡献 Rashba 场  $\lambda_0^i$  时， $\Gamma_{\text{DP}}$  可以变大（比如，当  $\lambda_0^i \bar{\delta} > 0$ ）或者被压制。因而，对于单边附着的构型，当由衬底贡献的平均 Rashba 场不抵消随机附着原子的贡献（比如，当  $\lambda_0^i \bar{\delta} \geq 0$ ）而且除了电子-附着原子之外的散射不是特别强时（也就是说， $\tau_{p,i}^{-1}$  不是异常的大），由自旋翻转散射导致的自旋弛豫可以忽略不计。在这种情

形下，自旋弛豫由 DP 机制支配，平均的 Rashba 场主要来自随机附着原子的贡献。在后面第 8 章中对石墨烯里自旋输运的研究中，附着原子的效应正是这样被考虑进来的。对于其它情形，随机 Rashba 场导致的自旋翻转散射对自旋弛豫的贡献和 DP 机制比起来是否重要，是依赖于具体的条件的。但是没有疑问的是，当平均的 Rashba 场趋近于零时，随机 Rashba 场导致的自旋翻转散射会变得重要。在文献 [269] 中，波纹状的石墨烯中的平均的 Rashba 场是零，自旋弛豫纯粹由自旋翻转散射贡献。但是，这个模型给出的自旋弛豫时间在 10 ns 的量级，比实验值大两个量级。

### 7.1.3 数值结果

为了将所有的散射完整地包含进来，我们数值求解动力学自旋 Bloch 方程。我们设置电子系统的初始极化为  $P(0) = 0.05$ 。为了和实验比较，我们取初始自旋极化方向在平面内，比如沿着  $y$  轴。

#### 7.1.3.1 自旋弛豫对附着原子浓度的依赖

我们首先在单边附着原子的构型下看自旋弛豫对附着原子浓度的依赖。在图 7-2 左图中，我们给出了平面内的自旋弛豫率对附着原子浓度（刻度在图的上边框）或者电荷扩散系数倒数（刻度在图的下边框）的依赖。温度为  $T = 300$  K，电子浓度为  $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ，衬底的杂质浓度为  $n_i^s = 0.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 。模型参数我们选择为  $\delta = 5 \text{ meV}$  以及  $\xi = 0.5 \text{ nm}$ 。在图中，具有不同  $\lambda_0^i$  的自旋弛豫率由曲线表示。每条曲线附近的数据点是在不考虑自旋翻转散射的情况下计算得到的结果。曲线和对应的数据点间的微小差别表明自旋弛豫主要由 DP 机制支配。可以发现，在背景 Rashba 场  $\lambda_0^i$  的很大变化范围内，曲线显示出类 EY 机制的行为，也即，自旋弛豫率和动量弛豫率成正比。只有当  $\lambda_0^i$  足够大时 [大于  $2c_2c_1^{-1}\tau_{p,i}^{-1}(k_f) \approx 0.05 \text{ meV}$ ，如同前面 7.1.2.2 章节所讨论的]，在低的附着原子浓度区，自旋弛豫率随着附着原子浓度的增大而变小，从而体现出常规 DP 机制的行为。

我们进一步应用单边附着原子的模型去研究 Riverside 组 Pi 等人的实验。在他们的实验中，石墨烯中的自旋弛豫体现出明显的常规 DP 机制的行为。在 18 K，随着表面掺杂使得表面附着 Au 原子浓度的上升（尽管 Au 原子会电离提供电子，但是通过调节门电压，电子浓度维持在  $2.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ），电荷的扩散系数下降而自旋弛豫时间变长，如图 7-2 右图中带误差棒的叉所显示。通过拟合在表面掺金之前的实验数据，我们可以得到  $\lambda_0^i = 0.153 \text{ meV}$  以及  $n_i^s = 2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  [450]。在掺金的过程中，利用合适的参数，比如  $\delta = 2.03 \text{ meV}$  和  $\xi = 0.5 \text{ nm}$ ，可以重复出实验上得到的数据，除了在  $n_i^a$  大于  $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  的区域（如实线所示）。假设在  $n_i^a$  足够大的时候， $\xi$  随着  $n_i^a$  的增大而减小（图 7-2 右图中的插图所示），则数值计算可以重复出大  $n_i^a$  区域的实验数据（短划线）。和图 7-2 左图类似，实线附近的点来自去掉自旋翻转散射后的计

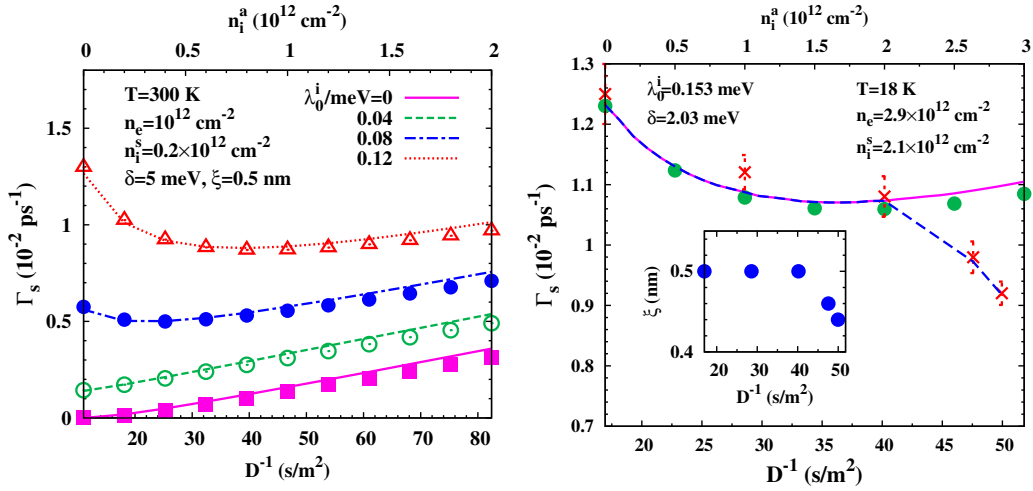


图 7-2: 左图: 平面内的自旋弛豫率对附着原子浓度 (刻度在图的上边框) 或者电荷扩散系数倒数 (刻度在图的下边框) 的依赖。温度为  $T = 300$  K, 电子浓度为  $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , 衬底的杂质浓度为  $n_i^s = 0.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 。模型参数我们选择为  $\delta = 5 \text{ meV}$  以及  $\xi = 0.5 \text{ nm}$ 。不同的曲线在不同的  $\lambda_0^i$  值下计算得到。对于每一条曲线, 附近的数据点是在不考虑自旋翻转散射的情况下计算得到的结果。右图: 平面内的自旋弛豫率对附着原子浓度 (刻度在图的上边框) 或者电荷扩散系数 (刻度在图的下边框) 的依赖。温度为  $T = 18 \text{ K}$ , 电子浓度为  $n_e = 2.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , 衬底的杂质浓度为  $n_i^s = 2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 。带误差棒的叉点来自 Pi 等人的实验数据 [286]。实线为用单边附着原子模型对实验的拟合, 所采用的参数为  $\lambda_0^i = 0.153 \text{ meV}$ ,  $\delta = 2.03 \text{ meV}$  和  $\xi = 0.5 \text{ nm}$ 。附近的圆点为去掉自旋翻转散射项后计算得到的结果。短划线是利用和实线一样的参数计算的结果, 除了在  $n_i^a > 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  时考虑进了  $\xi$  随着  $n_i^a$  增大而减小的效应 (插图)。

算结果 ( $\xi$  被固定在  $0.5 \text{ nm}$ )。实线和点之间的细微差别确实表明随机 Rashba 场导致的自旋翻转散射是不重要的。

### 7.1.3.2 自旋弛豫对电子浓度的依赖

我们通过拟合 Groningen 小组的 Józsa 等人的实验研究自旋弛豫对电子浓度的依赖。他们的实验体现出类 EY 机制的效应。在室温下, 当电子浓度从  $0.16$  增大到  $2.81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  时 (调节门电压实现), 电荷的扩散系数和自旋弛豫时间都增大, 而后者正比于前者 (图 7-3 中的方框)。需要注意的是, 这种类型 EY 机制的行为不能用图 7-2 左图中几乎线性的曲线解释, 因为那里的线性是在固定电子浓度时增加附着原子浓度出现的。事实上, 根据前面 7.1.2 小节中的研究, 在随机附着原子模型的参量固定时, 随着  $n_e$  的增大以及相伴随的扩散系数  $D$  的增大 (或者动量弛豫时间的增大),  $\Gamma_{\text{flip}}$  和  $\Gamma_{\text{DP}}$  都应该增大 [参考方程 (7.31) 和 (7.34)]。但是, 在下面我们会发现, 在假设  $\xi$  随着  $n_e$  的增大而减小时, 单边附着和双边附着原子模型 (因而 DP 机制和自旋翻转散射机制分别占主导) 都可以拟合实验数据。



在图 7-3 左图中，我们展示了用单边附着原子模型（因而 DP 机制占主导）对 Józsa 等人实验数据的拟合。方框代表实验数据，而空心圆圈是计算的结果。拟合参数设定为  $\lambda_0^i = 0.127 \text{ meV}$ 、 $n_i^a = 0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及  $\delta = 4 \text{ meV}$ 。为了重复出实验上扩散系数对电子浓度的依赖，必须要求衬底里的杂质浓度  $n_i^s$  随着  $n_e$  的增大而增大（这也许可以由杂质电离增强来理解；否则如果  $n_i^s$  固定，则  $D$  会随着  $n_e$  的增加而更快的变大），如图 7-3 左图中小插图里的圆点所示。同时，随着  $n_e$  的增大，为了解释  $\tau_s$  的增大， $\xi$  应该随着  $n_e$  的增大而下降，如插图中的三角所示（刻度在图的右边）。否则，如果  $\xi$  是固定的，则随着  $D$  的增大， $\tau_s$  会由于  $\Gamma_{\text{DP}}$  的增大而下降，如图中的短划线所示。在图 7-3 右图中，我们同时给出了基于双边附着原子模型的一种可行的拟合。拟合参数  $\lambda_0^i = 0$ ， $n_i^a = 0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及  $\delta_1 = -\delta_2 = 5 \text{ meV}$ 。插图展示了在  $n_e$  增大时， $\xi$ （刻度在图右边的空心三角）和  $n_i^s$ （实心圆圈）对  $D$  的依赖。在这个拟合中，只有随机 Rashba 场导致的自旋翻转散射贡献自旋弛豫。

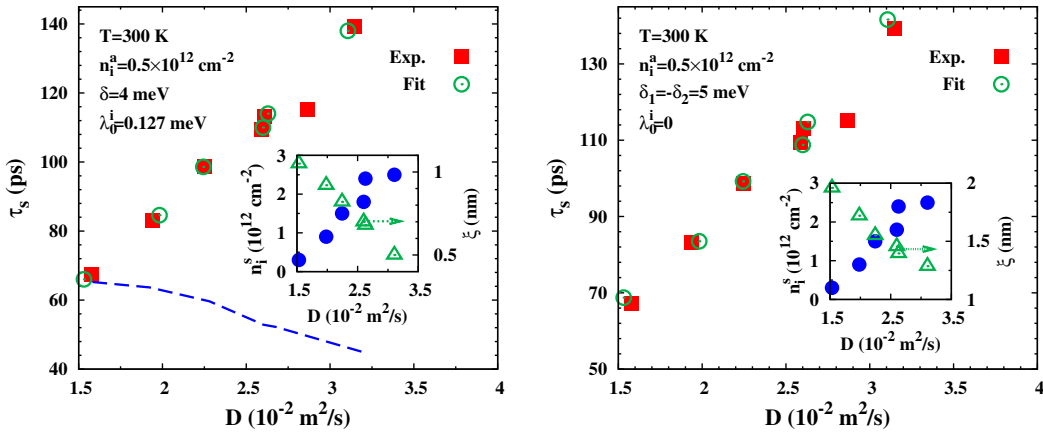


图 7-3: 左图和右图：分别基于单边和双边附着原子模型对 Józsa 等人的实验数据（随着电子浓度的增大，自旋弛豫时间  $\tau_s$  对电荷扩散系数  $D$  的依赖）[285] 的拟合。方框代表实验数据，而空心圆圈来自数值计算。插图给出  $n_e$  增大时， $\xi$ （刻度在图右边的空心三角）和  $n_i^s$ （实心圆圈）对  $D$  的依赖。在左图中，我们用短划线画出了在固定  $\xi$  为 1.05 nm 时计算得到的结果。拟合参数给在图中。

### 7.1.3.3 自旋弛豫时间对温度的依赖

我们接着研究自旋弛豫时间对温度的依赖。尽管在前面章节 7.1.2 中，我们指出 DP 机制决定的自旋弛豫时间随着温度的升高而变长，这个依赖在电子杂质散射主导（ $\text{SiO}_2$  衬底上的石墨烯满足这个条件）时变得非常微弱，如文献 [246] 中的图 1 所体现的那样（注意到那里所研究的系统中迁移率甚至比我们这里所研究的系统中的迁移率大一个量级）。由随机 Rashba 场导致的自旋翻转散射决定的自旋弛豫时间对温度也不

敏感, 如图 7-4 所显示的那样。因此, 当其它参数固定时, 石墨烯中的自旋弛豫对温度的依赖是非常微弱的。

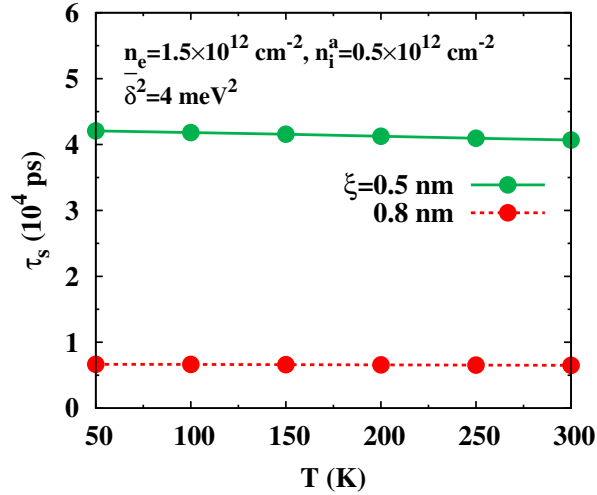


图 7-4: 自旋翻转散射导致的弛豫时间对温度的依赖。计算所用的参数为  $n_e = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $n_i^a = 0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  和  $\delta^2 = 4 \text{ meV}^2$ 。实线:  $\xi = 0.5 \text{ nm}$ ; 点线:  $\xi = 0.8 \text{ nm}$ 。

非常有趣的是, 最近, Riverside 小组观察到了  $\tau_s$  随  $T$  的增大而变小的现象 [287]。此外, 当温度  $T$  固定时, 随着电子浓度  $n_e$  的增大 (由门电压调控),  $D$  和  $\tau_s$  都变大, 和 Józsa 等人观察到的现象类似 [285]。随着温度  $T$  的上升,  $\tau_s$  的下降也许是由于随机 Rashba 场的关联长度  $\xi$  的变大造成的, 不管是 DP 机制主导还是自旋翻转散射机制主导。和上面一节所表明的一样, 随着电子浓度的变化, Riverside 小组观察到的  $\tau_s$  和  $D$  的线性关系并不能决定哪种自旋弛豫机制占主导。

作为可能的方案, 我们分别基于单边和双边附着原子模型, 假设  $\xi$  随着温度的升高而变大, 拟合了自旋弛豫时间对温度的依赖, 在图 7-5 左图和右图中给出了可行的拟合结果。拟合参数给在图中。实验上, 当门电压为  $V_g = 20 \text{ V}$  (60 V) 时 (费米面位于 Dirac 点处时的门电压取为零点), 电子浓度  $n_e = 1.47 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  ( $4.42 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) <sup>②</sup>。在图 7-5 中两个图的 (a) 和 (b) 中, 方框 (空心圆圈) 分别为门电压  $V_g = 20 \text{ V}$  (60 V) 下自旋弛豫时间和扩散系数对温度依赖的实验数据, 而实线 (破折线) 为对应门电压下我们的计算结果。在两个图的 (c) 中, 我们给出了  $\xi$  随  $T$  的变化, 其中实线 (破折线) 对应门电压  $V_g = 20 \text{ V}$  (60 V) 的情形。在两图的 (c) 中, 我们同时还给出了  $n_i^s$  随  $T$  的变化 (刻度在图的右边), 其中点线 (链线) 对应门电压  $V_g = 20 \text{ V}$  (60 V) 的情形。我们在图 7-6 的左图和右图中分别在两种模型下进

<sup>②</sup>电子浓度来自文献 [287] 的 arXiv 版本 arXiv:1012.3435。

一步拟合了 100 K 下自旋弛豫时间对扩散系数的依赖。和前一节中的拟合一致，随机 Rashba 场的关联长度也被要求随着电子浓度的增大而变小。注意到，图中的空心方框是空穴系统或者在 Dirac 点附近的实验数据 [287]，因而在我们的拟合中不予考虑。

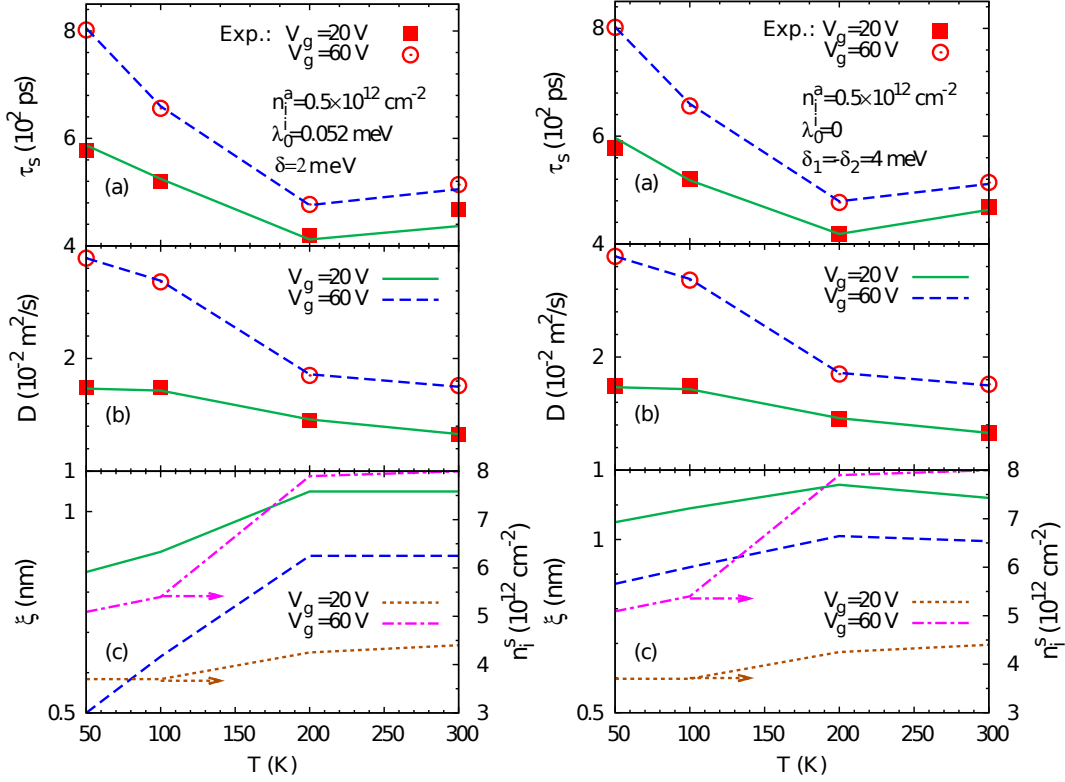


图 7-5: 左图和右图: 分别基于单边和双边附着原子模型对 Han 和 Kawakami 的实验数据的拟合 [287]。(a) 和 (b):  $\tau_s$  和  $D$  的温度依赖。方框 (空心圆圈) 分别为门电压  $V_g = 20$  V (60 V) 下自旋弛豫时间和扩散系数对温度依赖的实验数据, 而实线 (破折线) 为对应门电压下我们的计算结果。(c):  $\xi$  和  $n_i^s$  (刻度在图的右边) 的温度依赖。实线和点线对应  $V_g = 20$  V 的情形, 而短划线和链线对应  $V_g = 60$  V 的情形。

#### 7.1.3.4 $\tau_s$ 对 $D$ 的非单调依赖

在 Riverside [287] 和 Groningen [285] 小组的实验中, 自旋弛豫时间  $\tau_s$  都被观察到对  $D$  单调依赖。但是, 最近, 在 4.2 K, 随着电子浓度的增大,  $\tau_s$  对  $D$  的非单调依赖被 Jo 等人报告 [288]。尽管这个现象是在石墨烯的空穴系统中观察到的, 但是由于电子-空穴在能带结构上的对称性, 我们可以将其当作电子处理。同样, 这种非单调的依赖可以用单边或者双边附着原子模型拟合。在图 7-7 中, 我们给出了参数  $n_i^a = 0.5 \times 10^{12}$  cm $^{-2}$ ,  $\lambda_0^i = 0.127$  meV 以及  $\delta = 4$  meV 下单边附着原子模型的拟合结果。实心的方框 (实心的三角) 是自旋弛豫时间  $\tau_s$  的实验数据 (拟合结果), 而空心的方框 (实心的圆圈) 是扩散系数  $D$  的实验数据 (拟合结果)。插图给出了  $\xi$  (刻度在右边的空心三角) 和  $n_i^s$  (实心圆点) 对浓度的依赖。

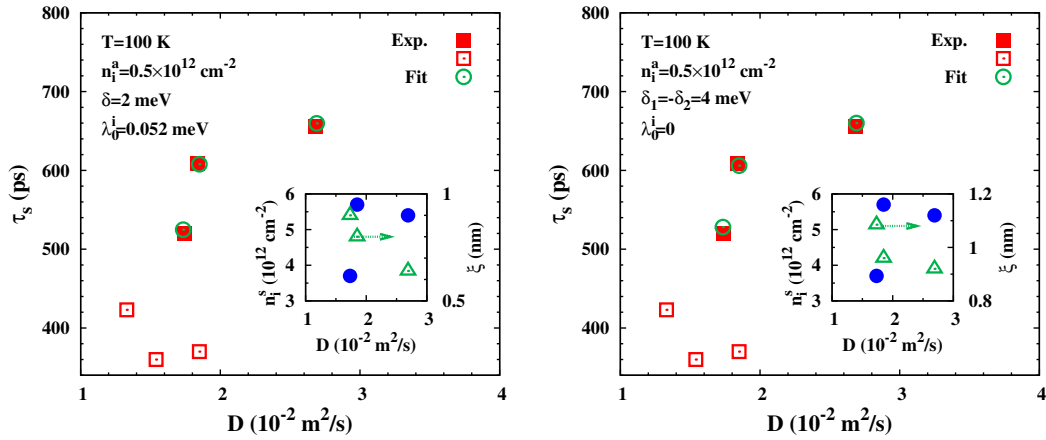


图 7-6: 左图和右图: 分别基于单边附着原子模型对 Han 和 Kawakami 的实验数据 (随着电子浓度的增大, 自旋弛豫时间  $\tau_s$  对电荷扩散系数  $D$  的依赖) 的拟合 [287]。实心方框代表实验数据而空心圆圈来自我们的计算。插图给出了  $n_e$  增大时,  $\xi$  (刻度在图的右边) 和  $n_i^s$  对  $D$  的依赖。空心方框是对空穴系统或者在 Dirac 点附近的实验数据, 因而在我们的拟合中不予考虑。

### 7.1.3.5 影响随机 Rashba 场关联长度的可能因素

在我们对实验的拟合中, 随机 Rashba 场的关联长度  $\xi$  的变化是一个很重要的因素。我们发现,  $\xi$  随着电子浓度的增大而变小, 随着温度的升高而变大。同时也发现, 当附着原子浓度足够大的时候,  $\xi$  随着附着原子浓度的上升而变小。确实,  $\xi$  很有可能会受到这些因素的影响。例如, 关联长度也许会由于载流子的屏蔽效应而变小, 而这个效应在高浓度时明显。同时, 随着温度的上升, 附着原子也许倾向于形成集团, 因而加强非均匀性, 影响关联长度 [574]。此外, 描述石墨烯中短程随机势的关联长度的电子空穴坑的尺度在杂质浓度上升时会下降 [578]。我们期望类似的效应也可以在我们这个模型中出现, 即, 当附着原子浓度足够大时,  $\xi$  随着附着原子浓度的上升而变小。

### 7.1.4 小结和讨论

在这个研究中, 我们建立了一个随机 Rashba 场模型, 将附着原子和衬底对 Rashba 自旋轨道耦合的贡献都考虑了进来。随机 Rashba 场的平均值在 DP 机制下导致自旋弛豫, 而 Rashba 场的随机涨落导致自旋翻转散射, 贡献一种类 EY 的自旋弛豫机制。随着附着原子浓度的增大, 自旋翻转散射导致的自旋弛豫始终体现一种常规的 EY 机制的行为, 而 DP 机制则既可以体现类 EY 机制的行为, 也可以体现常规的 DP 机制的行为。

我们对不同的实验组的实验结果进行了拟合。通过拟合 Riverside 小组观察到的随着附着原子浓度的增大自旋弛豫所表现出来的常规 DP 机制的行为 [286], 我们发现

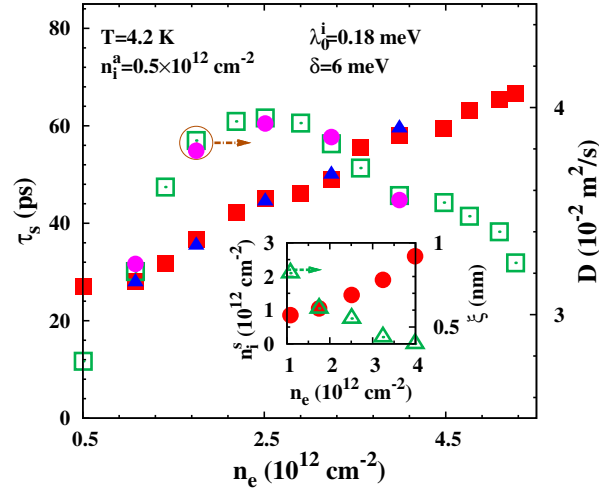


图 7-7: 基于单边附着原子模型对 Jo 等人实验数据 (自旋弛豫时间  $\tau_s$  和扩散系数  $D$  对电子浓度的依赖) 的拟合 [288]。实心方框 (实心三角) 是  $\tau_s$  的实验数据 (拟合结果), 空心方框 (实心圆圈) 是  $D$  (刻度在图的右边) 的实验数据 (拟合结果)。插图给出了  $\xi$  (刻度在右边的空心三角) 和  $n_i^s$  (实心圆点) 对浓度的依赖。  $n_i^a = 0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\lambda_0^i = 0.18 \text{ meV}$  以及  $\delta = 6 \text{ meV}$ 。

只有在 DP 自旋弛豫机制占主导的情况下实验数据才能被理解。注意到在附着原子浓度低的区域, 随机 Rashba 场的关联长度  $\xi$  被认为是常数, 而当  $\xi$  固定时,  $\Gamma_{\text{flip}}$  随着附着原子浓度的上升是变大的。因此, 以自旋翻转散射占主导的尝试性拟合不可能重复出实验观察到的现象, 从而被排除。但是, Groningen 小组在电子浓度增大过程中观察到的类 EY 机制的行为, 则在考虑进  $\xi$  随电子浓度增加而变小的效应后, DP 机制占主导或者自旋翻转散射占主导的模型都可以进行拟合。然而, Riverside 小组于最近在他们的样品中也观察到了类 EY 机制的效应这一事实 [287], 连同他们之前所观察到的自旋弛豫对附着原子浓度的依赖 [286], 表明 DP 机制是主导的弛豫机制, 只是它在浓度依赖的实验中体现出类似 EY 机制的行为。在自旋弛豫对电子浓度依赖的实验中, Groningen 小组 [285] 所观察到的和 Riverside [287] 小组所看到的类似的实验现象进一步表明在 Groningen 小组的实验中, DP 自旋弛豫机制也是主导的机制。因而, 对于这里我们所考察的有限几个实验, 如果要用一个统一的自旋弛豫机制来理解, 我们需要借助于 DP 机制。

最后需要指出的是, 在我们的这个研究之后, 新的实验表现出了非常引人关注的现象。在我们所拟合的实验中 [285–288], 除了 Riverside 组的表面化学掺 Au 原子的实验 [286] 保持电子浓度不变, 其它实验为了得到自旋弛豫时间和动量弛豫时间的依赖关系, 都通过用门电压调节电子浓度的手段来调节动量散射 [285, 287, 288]。这种方法除了造成电子浓度的改变, 还有可能同时造成其它参量 (比如衬底的杂质浓度) 的变

化，从而使问题复杂化。最近，Riverside 组对实验方案做了改进。他们在以  $\text{SiO}_2$  为衬底的石墨烯上利用有机配合基束缚纳米颗粒  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  作为电荷库来提供库仑势杂质散射 [455]（见图 3-6 左图）。通过门电压操控和降温冷却手段，他们成功的在保持石墨烯中电子浓度不变的前提下，通过调节纳米颗粒的带电量来调整动量散射。在 10 K 的温度下，他们发现，自旋弛豫时间可以达到 ns 的量级，但是它却对动量散射几乎没有依赖（见图 3-6 右图）。另外，Riverside 组还在  $\text{SiO}_2$  衬底上的石墨烯中在 12 K 的温度下重复了表面化学掺杂的实验 [456]，只不过用 Mg 原子代替了之前用的 Au 原子 [286]。他们同样得到了 ns 量级的自旋弛豫时间。但是，和之前表面掺 Au 的实验所表现的自旋弛豫时间和动量弛豫时间成反比的性质不一样 [286]，他们在这个实验中也同样观察到自旋弛豫对动量散射没有依赖（图 3-7 右图） [456]。此外，Groningen 小组还在悬空的石墨烯中进行了自旋运输的测量（实验装置的扫描电镜图见图 3-10 右图）。这时，电子的迁移率进一步提高 [ $\sim 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V s})$ ]。但是，自旋扩散长度仍旧在  $\mu\text{m}$  量级，自旋弛豫时间在 100 ps 的量级 [470]。这些结果都和该实验组在  $\text{SiO}_2$  衬底上的石墨烯中得到的结果很类似，尽管在石墨烯被悬空后动量散射被明显减弱。以上这三个实验都直接的表明了石墨烯中自旋弛豫对自旋守恒散射的不敏感性。

自旋弛豫对自旋守恒散射的不敏感性显然不是 DP 机制所具有的性质。同时，根据我们的研究，随机 Rashba 场导致的自旋翻转散射这一类 EY 机制对除了附着原子之外的其它因素产生的自旋守恒散射确实不敏感 [见方程 (7.25)]。因而，以上这些实验一方面给出了排除 DP 机制的信号，另一方面却又对类 EY 机制提供了支持。如果是这种类 EY 机制主导石墨烯中的自旋弛豫，那么在 Riverside 组的最近的表面掺 Mg 的实验中 [456]，随机 Rashba 场可能是由 Mg 原子之外的其它质量上也许更重的附着原子导致的，并因此对 Mg 的掺杂不敏感。这些未知的“其它附着原子”很有可能是在实验上放置铁磁电极的时候引入的。

实际上，正如我们的研究和实验所表明的，从自旋弛豫对动量散射的依赖的角度出发来确定石墨烯中主导的自旋弛豫机制并不直接和显然。在第 8 章，我们将研究石墨烯中的自旋运输，并试图根据在 DP 和类 EY 机制下自旋运输性质上的不同来帮助确定石墨烯中主导的自旋弛豫机制（见章节 8.6）。

## 7.2 低迁移率的波纹状石墨烯中的自旋弛豫

最近，Jeong 等人报告，在石墨烯中，结构的弯曲在赝自旋空间不仅导致非对角的 Rashba 型自旋轨道耦合，还导致额外的对角的自旋轨道耦合 [319]。这个额外的自旋轨道耦合类似于一个 Zeeman 项，不过在  $\mathbf{K}$  和  $\mathbf{K}'$  能谷中具有相反的符号。这种情况和碳纳米管类似 [579–581]，只是在这里自旋轨道耦合还存在实空间的涨落。从这个有效的自旋轨道耦合出发，Jeong 等人研究了化学上比较干净的、电子平均自由程远远大于自旋轨道耦合在空间上的涨落尺度的样品中的自旋弛豫。由于自旋轨道耦合在空间的平均效应为零，自旋弛豫仅仅由自旋轨道耦合的涨落导致的自旋翻转散射提

供 [252, 267, 269], 就如同 Dugaev 等人在起伏的石墨烯中的研究一样, 只不过在后者的研究中仅仅考虑了 Rashba 型的自旋轨道耦合 [269]。Jeong 等人的研究表明, Rashba 型自旋轨道耦合的涨落产生的自旋翻转散射对自旋弛豫的贡献与类 Zeeman 项的贡献可比, 导致 10 ns 量级的自旋弛豫时间 [319]。

但是, 对于极低迁移率的样品, 自旋弛豫由局部的弯曲导致的自旋轨道耦合决定 [271]。对于每个独立的能谷, Rashba 型自旋轨道耦合, 连同类 Zeeman 项, 在 DP 自旋弛豫机制下, 仍然导致微秒量级的自旋弛豫时间。但是, 谷间散射使这两个能谷不再独立。两个能谷的相反的有效磁场, 连同谷间散射, 提供了一个自旋弛豫的通道。该效应可以从一个简单的模型来理解。我们记每个能谷里的自旋矢量为  $\mathbf{S}_\mu$ ,  $\mu = \pm 1$  分别标记  $\mathbf{K}$  和  $\mathbf{K}'$  能谷。这个自旋矢量在每个能谷里绕着来自于类 Zeeman 项的有效磁场进动, 频率为  $\omega_\mu$ , 且  $\omega_\mu = -\omega_{-\mu}$  以及  $|\omega_\mu| = \omega$ 。谷间的散射由一个散射时间  $\tau_v$  描述。自旋极化矢量满足方程

$$\dot{\mathbf{S}}_\mu(t) + \mathbf{S}_\mu(t) \times \boldsymbol{\omega}_\mu + [\mathbf{S}_\mu(t) - \mathbf{S}_{-\mu}(t)]/\tau_v = 0. \quad (7.35)$$

当初态为  $\mathbf{S}_\mu(0) = \mathbf{S}_{-\mu}(0) = \mathbf{S}_0$  且  $\mathbf{S}_0$  沿着石墨烯平面内垂直于有效磁场的方向时, 在强的谷间散射条件  $\omega\tau_v \ll 1$  下可以得到解

$$\sum_{\mu} \mathbf{S}_\mu(t) = 2\mathbf{S}_0 e^{-t/\tau_s}, \quad (7.36)$$

其中  $\tau_s = 2/(\omega^2\tau_v)$ 。石墨烯中的这个自旋弛豫机制在之前的研究中还没有被认识到。在这一节, 我们进行相关的研究。

### 7.2.1 模型

我们考虑的样品是具有低迁移率 ( $\sim 2 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ) 的准周期波纹状的石墨烯 [463]。电子的平均自由程  $l$  小于波纹状起伏的周期  $\xi$ 。这种石墨烯样品可以通过首先在铜上化学气相沉积然后转移到  $\text{SiO}_2$  衬底上的方法得到。在图 7-8 的上部区域, 我们给出了这种波纹状石墨烯的表面形态的示意图。石墨烯沿着  $x$  方向弯曲。我们定义  $y$  轴与一个碳碳键在逆时针方向的夹角为  $\alpha$  ( $0 \leq \alpha < 2\pi/3$ )。波纹的尺度和高度分别在 50 和 1 nm 的量级, 曲率半径  $R$  为 100-200 nm。根据文献 [319], 由弯曲导致的局部的自旋轨道耦合为

$$H_{\text{soc}} = \zeta\kappa(\mu\sigma_x s_y - \sigma_y s_x) + \mu\zeta'\kappa\mathbf{b} \cdot \mathbf{s}, \quad (7.37)$$

这里  $\mathbf{b} = (\cos(\pi/2 + 3\alpha), \sin(\pi/2 + 3\alpha), 0)$ , 如图 7-8 的上部分所示。曲率  $\kappa = R^{-1}$ 。参数  $\zeta = 0.15 \text{ meV}\cdot\text{nm}$  以及  $\zeta' = 0.21 \text{ meV}\cdot\text{nm}$  [319]。在方程 (7.37) 的右边, 第一项是之前文献中指出的 Rashba 型自旋轨道耦合 [376], 第二项是在赝自旋空间对角的额外的类 Zeeman 项 [319]。

电子的有效哈密顿量为

$$H = \sum_{\mu\kappa ss'} [\varepsilon_{\mathbf{k}} \delta_{ss'} + (\boldsymbol{\Omega}_{\mu\mathbf{k}} + \frac{1}{2}g\mu_B \mathbf{B}) \cdot \mathbf{s}_{ss'}] c_{\mu\kappa s}^\dagger c_{\mu\kappa s'} + H_{\text{int}}. \quad (7.38)$$

$g \approx 2$  是有效的 Landé 因子 [582,583],  $\mathbf{B}$  是外加的磁场 (如果施加, 它的强度非常小, 对于轨道运动的影响可以忽略 [582,583])。来自于自旋轨道耦合的有效磁场为

$$\boldsymbol{\Omega}_{\mu\mathbf{k}} = \zeta\kappa(-\sin\theta_{\mathbf{k}}, \cos\theta_{\mathbf{k}}, 0) + \mu\zeta'\kappa\mathbf{b}. \quad (7.39)$$

方程右边的第二项扮演类 Zeeman 项的角色, 在  $\mathbf{K}$  ( $\mathbf{K}'$ ) 能谷中有效静磁场分别沿着  $\mathbf{b}$  ( $-\mathbf{b}$ ) 的方向。不包含与包含第二项的有效磁场的示意图画在图 7-8 的下部, 其中  $\alpha$  设为 0, 因而  $\mathbf{b}$  沿着  $y$  轴。哈密顿量  $H_{\text{int}}$  包含谷内和谷间的散射。前者包含电子-杂质散射 [573], 电子-远程界面声子散射 [577], 电子-声学声子散射 [575], 电子- $\Gamma$ - $E_{2g}$  光学声子散射 [576] 以及电子-电子库仑散射 [246]。后者包含电子- $\mathbf{K}$ - $A'_1$  光学声子 [576] 和 电子-电子库仑散射 [246]。

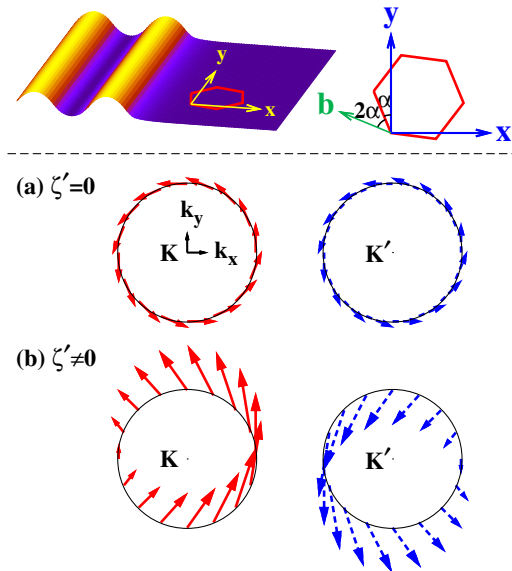


图 7-8: 水平短划线的上部: 沿着  $x$  方向弯曲的波纹状石墨烯的示意图。  $y$  轴与一个碳碳键在逆时针方向的夹角为  $\alpha$  ( $0 \leq \alpha < 2\pi/3$ )。水平短划线的下部: 在  $\mathbf{K}$  和  $\mathbf{K}'$  能谷中来自自旋轨道耦合的有效磁场的示意图。(a) 仅仅由 Rashba 型自旋轨道耦合导致的有效磁场 ( $\zeta' = 0$ ); (b) 由 Rashba 自旋轨道耦合和类 Zeeman 项导致的总的有效磁场 ( $\alpha = 0$ )。



## 7.2.2 数值结果

我们采用动力学自旋 Bloch 方程研究波纹状石墨烯中的自旋弛豫。通过求解动力学自旋 Bloch 方程，我们可以从沿着  $\mathbf{n}$  方向的自旋极化的时间演化得到该方向的自旋弛豫时间  $\tau_s$ 。在我们的计算中，除非特别说明，自旋的初始极化为  $P(0) = 10\%$ ，自旋极化方向  $\mathbf{n}$  沿着  $z$  轴，曲率为  $\kappa = 0.01 \text{ nm}^{-1}$ ，电子浓度  $n_e = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ，杂质密度  $n_i = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及外加磁场  $\mathbf{B} = 0$ 。对于沿着  $z$  方向的自旋弛豫，与  $\mathbf{b}$  的方向（由  $\alpha$  角决定）无关。

### 7.2.2.1 自旋弛豫的温度依赖

我们首先研究自旋弛豫的温度依赖。图 7-9 给出了不同曲率  $\kappa$  下自旋弛豫时间  $\tau_s$  随温度  $T$  的依赖。在所研究的整个温度范围内，电子的平均自由程  $l$  在 25 nm 左右 [对应的迁移率在  $2.6 \times 10^3 \text{ cm}^2/(\text{V s})$  左右]，如图 7-9 所示（尺度见左图的右边刻度）。因而电子的平均自由程总小于波纹的尺度。图 7-9 表明，当温度  $T \leq 100 \text{ K}$  时，自旋弛豫时间  $\tau_s$  在微秒量级。但是，当温度  $T$  超过 100 K 时， $\tau_s$  迅速下降，在 200-300 K 时达到几百 ps。然而，当温度继续升高到超过室温时， $\tau_s$  开始随着  $T$  的升高而增加。因而，随着温度的升高，自旋弛豫时间有个最小值。从图中还可以看出，曲率  $\kappa$  越大， $\tau_s$  达到最小值所需要的温度越高。另外，当  $T = 50 \text{ K}$  以及  $T > 250 \text{ K}$  时， $\tau_s$  与  $\kappa^{-2}$  成正比。但是，在中间的温度区  $100 < T < 250 \text{ K}$ ，在不同的  $\kappa$  下，自旋弛豫时间几乎一样。这些现象理解如下。

我们首先关注  $\kappa = 0.01 \text{ nm}^{-1}$  的情形。当温度  $T \leq 100 \text{ K}$  时，谷间的电声散射可以忽略 [246]，两个能谷内的自旋独立的弛豫。这种情况下自旋弛豫由 Rashba 型的自旋轨道耦合决定。类 Zeeman 项提供一个平面内的有效磁场，混合面内和面外的自旋弛豫 [503]。在上一节的研究中，我们知道，在只有 Rashba 自旋轨道耦合和强的电子-杂质散射时， $\tau_{\perp} = \tau_{\parallel}/2 = \hbar^2/(4\zeta^2\kappa^2\tau_p)$ ，这里  $\tau_{\perp}$  ( $\tau_{\parallel}$ ) 是平面外（内）的自旋弛豫时间， $\tau_p$  是动量散射时间 [247, 450]。因而在存在平面内有效磁场的情况下，沿着  $z$  轴的自旋弛豫时间为  $\tau_s = 2/(\tau_{\perp}^{-1} + \tau_{\parallel}^{-1}) = \hbar^2/(3\zeta^2\kappa^2\tau_p)$ 。利用  $\tau_p = l/v_f$ ，在  $T = 50 \text{ K}$  时可以估算出  $\tau_s \approx 2.4 \mu\text{s}$ ，正如图中所示。当温度  $T$  升高时，谷间的电子- $\mathbf{K}$ - $A_1'$  光学声子散射变得重要，它连同两个谷内相反的有效磁场打开另一个自旋弛豫的通道。根据前面介绍的简单模型，在弱的谷间散射极限  $\omega\tau_v \geq 1$ （对于此处的具体情况  $\omega = 2\zeta'\kappa/\hbar$ ），我们有

$$\sum_{\mu} \mathbf{S}_{\mu}(t) = \frac{2\mathbf{S}_0 e^{-t/\tau_v}}{\sqrt{1 - (\omega\tau_v)^{-2}}} \sin(\sqrt{\omega^2 - \tau_v^{-2}}t + \phi). \quad (7.40)$$

当  $\mathbf{S}_0$  与有效磁场方向垂直的时候， $\phi = \arctan \sqrt{\omega^2\tau_v^2 - 1}$ 。这个解表明自旋弛豫时间仅仅由谷间的散射决定，也就是说， $\tau_s = \tau_v$ 。因而，在弱的谷间散射极限下， $\tau_s$  随着温度的升高（谷间散射的增强）而减小。但是，在强的谷间散射极限下，如同方程 (7.36) 所示， $\tau_s = 2/(\omega^2\tau_v)$ ，自旋弛豫时间随着温度的升高而变长。随着温度的升高，谷间散

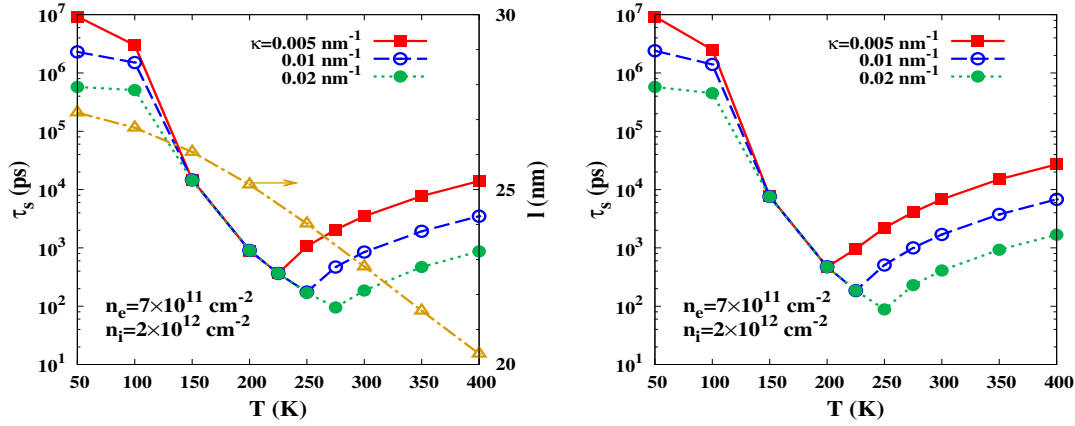


图 7-9: 实线, 短划线和点线分别表示在不同的曲率  $\kappa$  下自旋弛豫时间的温度依赖。链状线 (尺度在图的右边) 代表平均自由程的温度依赖。电子浓度  $n_e = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , 杂质浓度  $n_i = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 。左图的计算中电子-光学声子散射矩阵元采用的是文献 [246] 中附录部分给出的电子-光学声子散射的矩阵元, 该矩阵元有误, 是正确的形式的  $1/2$ 。右图是在更正的电子-光学声子散射矩阵元 (乘上 2 倍后) 下对左图的修正。在文中的具体论述中, 我们所根据的是利用文献 [246] 中附录部分给出的电子-光学声子散射的矩阵元计算得到的结果。

射从弱到强的过渡由  $\tau_v^{-1} \approx \omega = 2\zeta'\kappa/\hbar$  决定。在过渡点,  $\tau_s \approx \tau_v \approx \hbar/(2\zeta'\kappa)$ , 估算值为 170 ps, 正如图中的数值计算结果所显示的。

基于以上的分析, 我们知道, 在没有谷间散射的极限下  $\tau_s = \hbar^2/(4\zeta^2\kappa^2\tau_p)$ , 以及在强的谷间散射的极限下  $\tau_s = \hbar^2/(2\zeta'^2\kappa^2\tau_v)$ 。在两种极限下, 都有  $\tau_s \propto \kappa^{-2}$ 。但是, 在弱的谷间散射极限下,  $\tau_s$  由谷间散射时间  $\tau_v$  决定, 而对  $\kappa$  不敏感。另外, 自旋弛豫时间对温度的非单调依赖的转折点由  $\tau_v^{-1} \approx 2\zeta'\kappa/\hbar$  决定, 因而随着曲率  $\kappa$  的增大而向高温方向移动。这些性质在图 7-9 中由具有不同  $\kappa$  值的曲线体现出来。

### 7.2.2.2 谷间散射和自旋轨道耦合对自旋弛豫的影响

谷间散射包含库仑散射和电声散射。但是, 在这个研究所揭示的自旋弛豫通道中扮演重要角色的是谷间的电声散射。这是因为我们考虑的谷间库仑散射不会造成电子在两能谷间的转移。由于两个能谷中心大的动量差, 能够在两个能谷间造成电子转移的库仑散射非常微弱因而没有给予考虑。

作为比较, 在图 7-10 左图中, 我们在包含不同的谷间散射的情形下画出了自旋弛豫时间对温度的依赖。可以看见, 在整个研究的温度范围内, 谷间库仑散射不重要, 而谷间的电声散射对自旋弛豫有明显的影响。特别的, 当谷间的电声散射被排除后,  $\tau_s$  对  $T$  变得不敏感。这是因为在几乎独立的能谷中,  $\tau_s = \hbar^2/(3\zeta^2\kappa^2\tau_p)$ , 而  $\tau_p$  由电子-杂质散射所支配 [246, 291]。

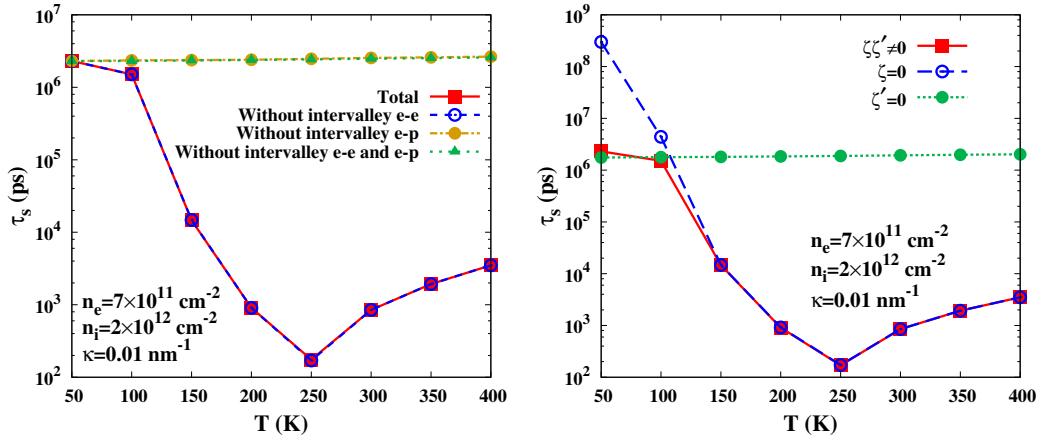


图 7-10: 左图: 包含不同的谷间散射的情况下, 自旋弛豫时间对温度的依赖。实线: 包含谷间的电子-电子 (e-e) 和电子-声子 (e-p) 散射; 短划线: 没有谷间的电子-电子散射; 链形线: 没有谷间的电子-声子散射; 点线: 没有谷间的电子-电子和电子-声子散射。电子浓度  $n_e = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , 杂质浓度  $n_i = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及曲率  $\kappa = 0.01 \text{ nm}^{-1}$ 。右图: 真实情况 ( $\zeta\zeta' \neq 0$ ), 没有类 Zeeman 项的情况 ( $\zeta' = 0$ ), 以及没有 Rashba 型自旋轨道耦合 ( $\zeta = 0$ ) 的情况下自旋弛豫时间对温度的依赖。电子浓度  $n_e = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , 杂质浓度  $n_i = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及曲率  $\kappa = 0.01 \text{ nm}^{-1}$ 。

在图 7-10 右图中, 我们进一步比较了真实情况 ( $\zeta\zeta' \neq 0$ ) 和没有类 Zeeman 项的情况 ( $\zeta' = 0$ ), 以及没有 Rashba 型自旋轨道耦合 ( $\zeta = 0$ ) 的情况下的自旋弛豫, 以揭示两种自旋轨道耦合对自旋弛豫的影响。当类 Zeeman 项被排除时, 两个能谷是简并的而且  $\tau_s = \tau_{\perp} = \hbar^2 / (4\zeta^2 \kappa^2 \tau_p)$  [247, 450]。图 7-10 右图中的点线很好的满足这个关系。当 Rashba 型的自旋轨道耦合被排除时, 自旋弛豫由两个能谷里相反的有效磁场联合谷间的散射导致。在低温下, 谷间散射被压制,  $\tau_s$  接近于无穷大。通过将  $\zeta = 0$  和  $\zeta' = 0$  的两条曲线与  $\zeta\zeta' \neq 0$  的真实情况比较, 可以发现, 对于真实情形, 在  $T \leq 100 \text{ K}$  时, 自旋弛豫由 Rashba 型自旋轨道耦合主导, 在  $T > 100 \text{ K}$  时, 自旋弛豫由类 Zeeman 项主导。

### 7.2.2.3 不同杂质和电子浓度下的自旋弛豫

我们在更高的杂质浓度  $n_i = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  下计算了自旋弛豫, 以研究杂质浓度对自旋弛豫的影响。在这个杂质浓度下, 电子的平均自由程  $l$  进一步变小 (和图 7-9 中所示的值相比)。在图 7-11 左图中, 我们画出了两个杂质浓度,  $n_i = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及  $n_i = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  下动量散射率的比率 [记为  $\eta(\tau_p^{-1})$ ] 和自旋弛豫时间的比率 [记为  $\eta(\tau_s)$ ] 对温度的依赖关系。可以看见, 在整个温度范围内,  $\eta(\tau_p^{-1})$  基本维持在 1.5, 因为电子-杂质散射主导  $\tau_p$ 。而  $\eta(\tau_s)$  在  $T = 50 \text{ K}$  时是 1.5, 然后随着温度的升高迅速下降到 1。这是因为只有当  $\tau_v^{-1} \lesssim \tau_{\perp}^{-1}$  ( $T < 150 \text{ K}$ ) 时, 自旋弛豫才对谷内的散射敏

感。特别地，当  $T = 50$  K 时， $\tau_s \propto \tau_p^{-1}$ ， $\eta(\tau_s) = \eta(\tau_p^{-1}) = 1.5$ 。当  $T \geq 150$  K 时，自旋弛豫对谷内散射不敏感，因而对杂质浓度的变化无依赖。

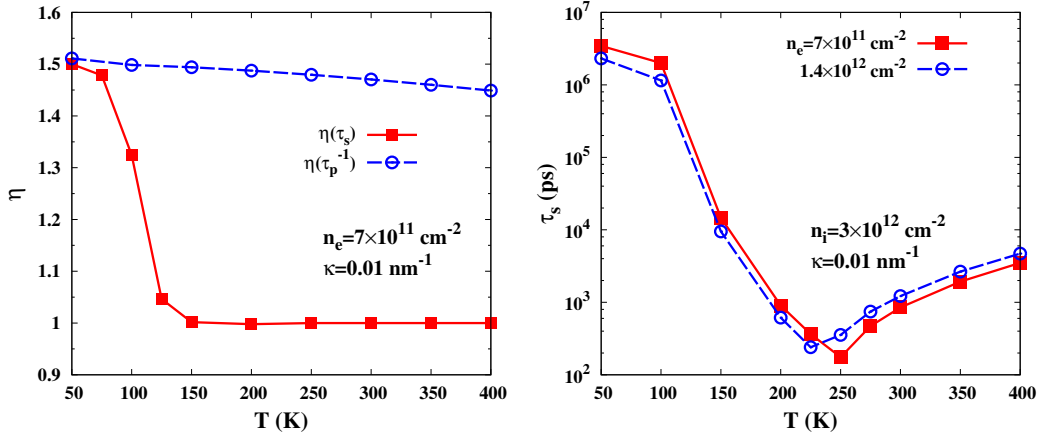


图 7-11: 左图: 两种杂质浓度,  $n_i = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及  $n_i = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  下, 动量弛豫率 [短划线, 标记为  $\eta(\tau_p^{-1})$ ] 和自旋弛豫时间 (实线, 标记为  $\eta(\tau_s)$ ) 的比。电子浓度  $n_e = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  以及曲率  $\kappa = 0.01 \text{ nm}^{-1}$ 。右图: 不同电子浓度下自旋弛豫的温度依赖。实线:  $n_e = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ; 短划线:  $n_e = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 。杂质浓度  $n_i = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及  $\kappa = 0.01 \text{ nm}^{-1}$ 。

虽然改变杂质浓度只对低温下 ( $T < 150$  K) 的自旋弛豫有影响, 但是电子浓度的改变会在很大的温度范围内影响自旋弛豫, 因为谷内和谷间的散射都依赖于电子的浓度。实际上, 随着电子浓度的升高, 谷内的电子-杂质散射强度减弱而谷间的电子-声子散射加强。因而, 随着电子浓度的增加, 只要条件  $l \ll \xi$  仍然满足, 自旋弛豫时间  $\tau_s$  在弱的谷间散射区变小 (当  $T \leq 100$  K 时,  $\tau_s \propto \tau_p^{-1}$ ; 当  $100 < T \leq 250$  K 时,  $\tau_s = \tau_v$ ), 而在强的谷间散射区变大 (当  $T > 250$  K 时,  $\tau_s \propto \tau_v^{-1}$ )。我们在更高的电子浓度  $n_e = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (杂质浓度取为  $n_i = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) 下计算了自旋弛豫。对于这种情形, 在温度  $T = 50$  K 时, 电子具有最大的平均自由程 30 nm。在图 7-11 右图中, 我们把在该高电子浓度下的自旋弛豫和  $n_e = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  以及  $n_i = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  情形下的自旋弛豫做了比较。确实发现, 随着电子浓度的增加,  $\tau_s$  在  $T < 250$  K 时减小, 在  $T \geq 250$  K 时变大。

当电子浓度进一步增大以致于  $l \geq \xi$  时, 这里讨论的自旋弛豫机制不再有效, 而自旋轨道耦合的涨落导致的自旋翻转散射对自旋弛豫有贡献 [252, 267, 269, 291]。当后者重要时, 自旋弛豫时间在 10 ns 的量级而且对温度不敏感 [269, 319]。

## 7.2.2.4 在有无垂直外加磁场下自旋弛豫的各向异性

上面的研究局限在  $z$  方向的自旋弛豫。事实上，由于平面内沿着  $\mathbf{b}$  方向的有效磁场，在垂直于  $\mathbf{b}$  的各个方向上的自旋弛豫时间是相同的。同时，根据前面的简单模型，沿着  $\mathbf{b}$  方向没有自旋弛豫。但是，由于 Rashba 自旋轨道耦合，在  $\mathbf{b}$  方向上有指数的自旋弛豫，弛豫时间  $\tau_s \approx \tau_{\parallel}$  ( $\tau_{\parallel}$  可以利用关系  $\tau_{\parallel} = 2\tau_{\perp}$  从图 7-10 右图中的点线所给出的  $\tau_{\perp}$  得到)。这个自旋弛豫时间在微秒的量级，而且对温度不敏感。由于平行和垂直于  $\mathbf{b}$  方向的自旋弛豫的不同，自旋弛豫在石墨烯平面内显现出各向异性。当初始的自旋极化方向  $\mathbf{n}$  偏离  $\mathbf{b}$  一个角度  $\theta_{\mathbf{n},\mathbf{b}}$  时，沿着  $\mathbf{n}$  方向的自旋极化以  $P(t) = P(0)[\cos^2 \theta_{\mathbf{n},\mathbf{b}} e^{-t/\tau_{\parallel}} + \sin^2 \theta_{\mathbf{n},\mathbf{b}} f(t)]$  的形式弛豫。这里，根据方程 (7.40) 和 (7.36)，在弱的谷间散射区  $\tau_{\perp}^{-1} \ll \tau_v^{-1} \leq \omega$  ( $100 < T < 250$  K)， $f(t) = \frac{e^{-t/\tau_v}}{\sqrt{1-(\omega\tau_v)^{-2}}} \sin(\sqrt{\omega^2 - \tau_v^{-2}}t + \phi)$ ；而在强的谷间散射区  $\tau_v^{-1} \gg \omega$  ( $T > 250$  K)， $f(t) = e^{-\omega^2\tau_v t/2}$ 。

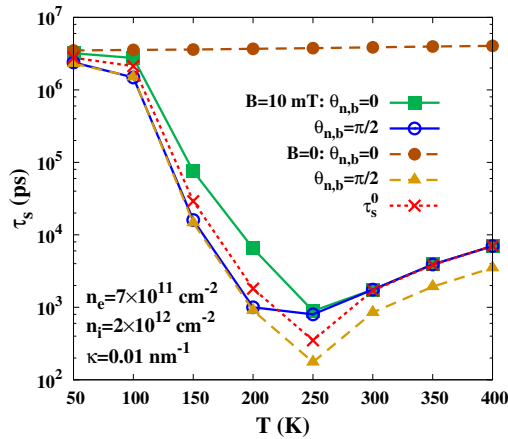


图 7-12: 在有（实线）和没有（短划线）沿着  $z$  方向的外加磁场的情况下，石墨烯平面内各个方向的自旋弛豫温度的温度依赖。有方框（空心圆圈）的实线：在有沿着  $z$  方向的 10 mT 磁场的情况下，平行（垂直于） $\mathbf{b}$  方向的自旋弛豫。有实心圆圈（三角）的短划线：在没有外加磁场的情况下，平行（垂直于） $\mathbf{b}$  方向的自旋弛豫。有十字叉的点线代表参量  $\tau_s^0$  的温度依赖， $\tau_s^0$  由没有外加磁场情形下平行和垂直于  $\mathbf{b}$  方向上的自旋弛豫率的平均得到。电子浓度  $n_e = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ，杂质浓度  $n_i = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及  $\kappa = 0.01 \text{ nm}^{-1}$ 。

通常，实验上，石墨烯中的自旋弛豫由 Hanle 效应测量研究 [237–239, 285–288, 463]。在这种测量中，一个小的磁场  $B$ （最多在 100 mT 量级）被施加在垂直于石墨烯平面的方向上。在这个磁场下，石墨烯平面内各个方向的自旋弛豫被混合。在这里被研究的波纹状石墨烯中，在强的谷间散射区 ( $T > 250$  K)，在平行和垂直于  $\mathbf{b}$  方向的自旋弛豫都具有指数形式，且弛豫率分别为  $\tau_{\parallel}^{-1}$  和  $\omega^2\tau_v/2$ 。因而，当  $B > \hbar|\tau_{\parallel}^{-1} - \omega^2\tau_v/2|/(2g\mu_B)$ （室温下大约为 10 mT），在石墨烯平面内的各个方向

自旋弛豫具有统一的速率  $\tau_s^{-1} = (\tau_{\parallel}^{-1} + \omega^2\tau_v/2)/2 \approx \omega^2\tau_v/4$  [503]。但是，在弱的谷间散射情形下 ( $T < 250$  K)，情况不一样，因为在垂直于  $\mathbf{b}$  的方向上有自旋进动 [参考方程 (7.40)]。我们施加 10 mT 的垂直磁场，数值计算了在平行 ( $\theta_{\mathbf{n},\mathbf{b}} = 0$ ) 和垂直 ( $\theta_{\mathbf{n},\mathbf{b}} = \pi/2$ ) 于  $\mathbf{b}$  方向上不同温度下的自旋弛豫。在有和没有外加磁场的情况下，沿着这两个方向的自旋弛豫时间的温度依赖被画在图 7-12 中。作为对比，我们也画出了参量  $\tau_s^0$  的温度依赖。 $\tau_s^0$  由没有外加磁场情形下平行和垂直于  $\mathbf{b}$  方向上的自旋弛豫率的平均得到。可以看见，由于外加的垂直磁场，在温度  $T > 250$  K 时，自旋弛豫在石墨烯平面内变得各向同性，且  $\tau_s^{-1} \approx \omega^2\tau_v/4$ 。但是，当  $T < 250$  K 时，这个各向异性被强烈压制但是还没有被完全排除。因而，不管角度  $\alpha$  以及测量的方向如何，在低迁移率的波纹状的石墨烯样品中，由 Hanle 效应所测量得到的自旋弛豫时间随着温度会有明显的非单调依赖，且在 200-300 K 附近有最小值。

### 7.2.3 小结

在这个小节中我们研究了低迁移率波纹状石墨烯中的自旋弛豫。电子的平均自由程小于波纹的尺度，因而自旋弛豫由弯曲导致的局域自旋轨道耦合决定。弯曲不仅导致 Rashba 型的自旋轨道耦合，还提供了类 Zeeman 项，它在两个能谷里扮演方向相反的静磁场的角色 [319]。我们的研究表明，这个类 Zeeman 项，连同谷间的电子  $-\mathbf{K}-A_1'$  光学声子散射，在高温下 ( $T > 100$  K) 提供有效的自旋弛豫通道。这个自旋弛豫通道导致垂直于类 Zeeman 项提供的有效磁场方向的自旋弛豫对温度的非单调依赖，并且使自旋弛豫时间在 200-300 K 附近有 100 ps 量级的最小值。但是，Rashba 自旋轨道耦合主导沿着类 Zeeman 项提供的有效磁场方向的自旋弛豫。在该方向上自旋弛豫时间对温度不敏感，具有微秒量级。在实验上的 Hanle 效应测量中，在垂直于石墨烯平面的外加磁场下，平面内弛豫的各向异性被大大压制。在实际的样品中，石墨烯的波纹状涨落也许不会和这里提出的样品一样具有好的周期性，因而观察到的自旋弛豫是低迁移率样品中弯曲形貌下的相干平均 [271]。

需要注意的是，这里揭示的自旋弛豫通道只在电子的平均自由程小于波纹的尺度的样品中才有用。对于电子平均自由程远远大于波纹尺度（或者涨落的自旋轨道耦合的关联长度）的石墨烯样品 [269, 291, 319]，这个机制消失，而由于随机自旋轨道耦合的涨落导致的自旋翻转散射将起作用 [252, 267, 269]。这里研究的自旋弛豫机制在碳纳米管中也存在，但是在 Semenov 等人的工作中 [581] 并没有考虑，因为谷间的散射被没有包含进来。

我们对 Avsar 等人在低迁移率的波纹状石墨烯样品中观察到的自旋弛豫 [463] 做一下讨论。在他们的样品中，电子的浓度为  $7.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。当温度从 5 上升到 300 K，通过 Hanle 效应测得的平面内自旋弛豫时间缓慢的从 130 ps 增加到 150 ps [463]。Avsar 等人估算了局域的自旋轨道耦合对自旋弛豫的贡献，发现和实验观测值比起来可以忽略（参见文献 [463] 的补充材料）。但是，他们仅仅考虑进了 Rashba 型的自旋轨道耦

合，而由它导致的自旋弛豫时间自然的要比实验测量长很多，上一节中已有论述。我们这里揭示的自旋弛豫通道对 200-300 K 附近的自旋弛豫提供了一种贡献。如果要理解实验上在整个大的温度范围内（尤其是谷间电声散射可以忽略的低温）的数据，其它因素，比如能够导致谷间散射的短程杂质，由于衬底和附着原子导致的随机增强的自旋轨道耦合 [247, 291, 315–317, 450]，可能需要考虑进来。

最近，Wang 和 Wu 在双层石墨烯中的研究发现，在门电压下最低导带电子的自旋轨道耦合本身就能够两个能谷中提供方向相反的有效磁场 [483]。因而，这里所研究揭示的自旋弛豫通道在门电压下的双层石墨烯中很自然地存在，对样品并没有特别的要求。Wang 和 Wu 的研究表明这种自旋弛豫通道在双层石墨烯中非常重要。

最后需要指出的是，文献 [246] 中附录部分给出的电子-光学声子散射的矩阵元有误，正确的形式是在原来的基础上乘以 2。由于在我们这个研究中正是谷间的电子-光学声子散射在谷间的非均匀扩展下导致有效的自旋弛豫，因此这个错误对我们的数值结果会有影响，但是对整个物理现象不会有影响。我们在正确的电声散射矩阵元下重新计算了图 7-9 左图中不同曲率下自旋弛豫时间对温度的依赖，并将结果给在图 7-9 的右图中。我们发现，在正确的电声散射矩阵元下（相对来说谷间电声散射加强了），自旋弛豫时间在温度依赖中的最低点向低温区移动，但是其幅度基本保持不变，因为它由谷间的方向相反的有效静磁场决定。对于本节研究中后面所呈现的结果，我们没有定量的给出更正，所有的讨论基于最初计算的结果。

## 第八章 石墨烯中的自旋输运

### 8.1 研究背景

在第 3 章中，我们介绍了不少对石墨烯中自旋弛豫的实验研究。这些实验本质上都是对自旋输运的测量 [237–239, 285–288, 363, 455, 456, 470, 471, 473, 478]。其中绝大部分是在非局域的自旋阀结构中施加外磁场引入 Hanle 效应，然后由非局域的磁阻信号对磁场的依赖反推出自旋弛豫时间  $\tau_s$  和扩散系数  $D$ 。人们从这两个量出发，利用无磁场下的漂移扩散模型给出的简单公式， $L_s = \sqrt{D\tau_s}$ ，得到石墨烯中的自旋扩散长度。有极少数实验在不加外磁场的情况下调节四端非局域自旋阀结构中中间两个铁磁电极的间距，从非局域的电压对这个间距的依赖直接得到自旋扩散长度 [237–239]。此外，Dlubak 等人利用两端的局域自旋阀结构的磁阻效应测量了 SiC 衬底上石墨烯中的自旋输运。以上这三种实验测量手段在章节 1.3.2 中给了介绍。

对 SiO<sub>2</sub> 衬底上石墨烯的输运测量都给出  $\mu\text{m}$  量级的自旋扩散长度 [237–239, 285–288, 363, 455, 456, 478]。相对应地，自旋弛豫时间在 100–1000 ps 的量级。在 SiO<sub>2</sub> 衬底上石墨烯的磁输运测量中，电子的迁移率一般在  $10^3 \text{ cm}^2/(\text{V s})$  的量级。对于其他衬底上的自旋输运的测量，在章节 3.1.1.8 中已经有过介绍。虽然对石墨烯里的自旋输运的实验测量很多，但是目前理论上的研究却非常少。在这一章里我们从理论上研究石墨烯里的自旋输运。尽管石墨烯中的自旋弛豫机制还没有完全清楚，而且如章节 7.1.4 所介绍的，最新的实验进展倾向于排除掉 DP 机制 [455, 456]，但是在我们的这个研究中，我们基于 Riverside 组 Pi 等人的表面掺 Au 实验的样品 [286]，认为在这个样品中主导的机制仍然是 DP 机制，并且在这个机制下研究石墨烯中的自旋输运。

我们假定涨落的衬底和随机的附着原子从平均的意义上极大增强了 Rashba 自旋轨道耦合。对于石墨烯，由于 Rashba 自旋轨道耦合具有如下的形式 [方程 (2.70)]，

$$\mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}} = \alpha_{\text{R}}(-\sin \theta_{\mathbf{k}}, \cos \theta_{\mathbf{k}}, 0), \quad (8.1)$$

因而在没有外加磁场的情况下，自旋在空间的进动频率为

$$\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} = 2\mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}}/\partial_{k_x}\varepsilon_{\mathbf{k}} = 2\alpha_{\text{R}}(-\tan \theta_{\mathbf{k}}, 1, 0)/(\hbar v_{\text{F}}), \quad (8.2)$$

它依赖于动量  $\mathbf{k}$  的幅角  $\theta_{\mathbf{k}}$ ，而不依赖其模长。这表明只要系数  $\alpha_{\text{R}}$  固定，自旋在空间进动的非均匀扩展对温度和电子浓度都不敏感。此外，平均的自旋进动频



率  $\langle \omega_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{2\alpha_{\text{R}}}{\hbar v_{\text{F}}} (0, 1, 0)$  显示出强的各向异性，因而导致自旋扩散对于注入的自旋极化方向各向异性。在这个研究中，我们首先拟合 Pi 等人对石墨烯的表面掺金的实验 [286]，得到随着 Au 浓度变大而线性的从 0.15 增大到 0.23 meV 的自旋轨道耦合系数。在这个强的自旋轨道耦合下，计算得到的自旋扩散和输运的长度与实验值可比。我们发现，在强散射极限下（电子-杂质散射主导），自旋扩散由 Rashba 自旋轨道耦合强度唯一决定，而对温度、电子浓度以及散射不敏感。我们对沿着自旋注入方向施加的电场、电子浓度以及注入的自旋的极化方向对自旋输运的影响都加以了研究和讨论。

## 8.2 模型

我们研究  $\text{SiO}_2$  衬底上的  $n$  型掺杂的石墨烯。假设衬底的厚度为  $a = 300 \text{ nm}$ ，因而沿着  $z$  方向的电场为  $E_z = V_g/a$ ，其中  $V_g$  是门电压。 $z$  方向垂直于石墨烯平面。自旋从  $x = 0$  处注入，沿着  $x$  方向扩散或者输运。如果施加电场，则其沿着  $x$  方向，也即， $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{x}}$ 。在文献 [246, 247] 给出的基下 [参考方程 (2.69) 和那里的讨论]，电子的哈密顿量为

$$H = \sum_{\mu\mathbf{k}ss'} [(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \lambda_{\text{I}} + eEx)\delta_{ss'} + \mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{s}_{ss'}] c_{\mu\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mu\mathbf{k}s'} + H_{\text{int}}. \quad (8.3)$$

Rashba 有效磁场  $\mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}}$  [方程 (8.1)] 的系数  $\alpha_{\text{R}} = \zeta E_z + \eta$ ，其中第一项来自于电场的贡献，第二项来自于衬底（包括可能的本身就存在的附着原子）和表面化学掺杂的引入的附着 Au 原子的贡献。系数  $\zeta \approx 5 \times 10^{-3} \text{ meV}\cdot\text{nm}/\text{V}$  [247, 316]。 $\mu$  标记不同的能谷。在这里，相互作用哈密顿量  $H_{\text{int}}$  包含电子-杂质 [573, 584]、电子-声子 [575–577]、以及电子-电子库仑散射 [246, 584]。我们没有考虑由于 Rashba 自旋轨道耦合的涨落导致的自旋翻转散射。

由于石墨烯 Dirac 点附近的线性能谱，描述该点附近的电子的动力学自旋 Bloch 方程 [11]（参考方程 4.1）中的扩散项为

$$\left. \frac{\partial \rho_{\mu\mathbf{k}}(x, t)}{\partial t} \right|_{\text{dif}} = -\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar \partial k_x} \frac{\partial \rho_{\mu\mathbf{k}}(x, t)}{\partial x} = -v_{\text{F}} \cos \theta_{\mathbf{k}} \frac{\partial \rho_{\mu\mathbf{k}}(x, t)}{\partial x}. \quad (8.4)$$

散射项和相干进动项的具体表达式在文献 [246] 中给出。

下面，我们首先通过拟合 Pi 等人的关于自旋弛豫的实验数据 [286] 来得到他们的样品中杂质和 Rashba 自旋轨道耦合系数对化学掺杂的依赖关系，然后利用这些信息先后从只包含电子-杂质散射的解析角度和包含所有散射的数值角度来研究石墨烯中的自旋扩散和输运。

## 8.3 自旋弛豫

我们拟合 Pi 等人实验得到的自旋弛豫时间和扩散系数对化学掺杂的依赖关系 [文献 [286] 中的图 3(c)] 来确定: (I) 存在于衬底中的杂质和化学掺杂引入的金原子杂质的有效浓度, 以及这两种杂质和石墨烯的有效距离; (II) Rashba 自旋轨道耦合系数  $\alpha_R$  对化学掺杂的依赖。根据实验, 电子浓度控制为  $N_e = 2.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , 温度为  $T = 18 \text{ K}$  [286]。电子自旋在  $x$ - $y$  平面内极化, 极化度假设为  $P_0 = 0.05$ 。我们在时间域数值求解动力学自旋 Bloch 方程以拟合实验。为了拟合实验上给出的扩散系数  $D$ , 我们在平面内施加了小电场后通过数值计算得到迁移率  $\mu_e$  [246], 然后利用公式  $D = \frac{\sqrt{\pi N_e}}{2e} \hbar v_F \mu_e$  (参考附录 ??) 数值上得到扩散系数。

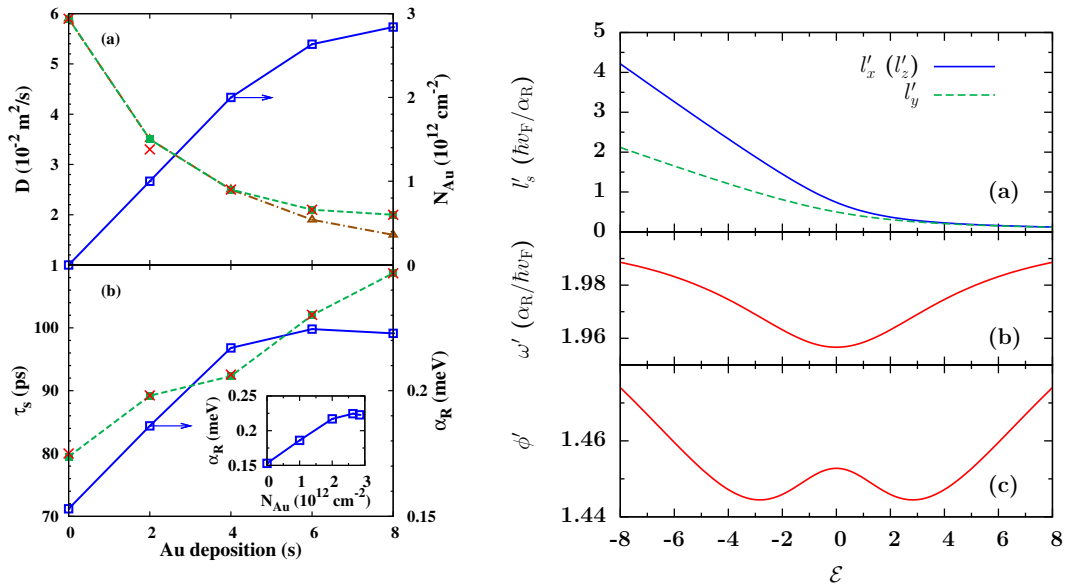


图 8-1: 左图: (a) 三角的链状线: 计算得到的扩散系数对 Au 的沉积时间的依赖关系, Au 原子的密度被假设随着时间以  $5 \times 10^{11} \text{ atom}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$  [286] 的速率线性增加。实心方框的短划线: 在 Au 的浓度随着沉积时间以实线 (刻度在右边) 变化时, 计算得到的扩散系数对 Au 的沉积时间的依赖关系。叉: Pi 等人的实验数据 [286]。(b) 实心方框的短划线: 在  $\alpha_R$  随着沉积时间以图中空心方框的实线 (刻度在右边) 变化时, 计算得到的自旋弛豫时间随着沉积时间的依赖关系。叉: Pi 等人的实验数据 [286]。(b) 中的插图:  $\alpha_R$  随着 Au 浓度的依赖关系。右图: (a) 自旋输运长度  $l'_{x,y,z}$ , (b) 自旋进动频率  $\omega'$ , 以及 (c) 相位角  $\phi'$  对  $\mathcal{E}$  的依赖。

我们首先利用文献中提供的没有表面掺杂时的扩散系数  $D \approx 0.059 \text{ m}^2/\text{s}$  [286] 得到衬底中杂质的信息。单独一个扩散系数不足以让我们同时定出衬底中杂质的有效浓度和距离石墨烯的有效距离。但是, 这些并不重要, 我们只需选择两个合适的参数, 比如, 衬底杂质浓度  $N_s = 2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及杂质层到石墨烯的有效距离  $d_s = 0.7 \text{ nm}$ , 来保证  $D \approx 0.059 \text{ m}^2/\text{s}$ 。表面化学掺杂在石墨烯表面以  $5 \times 10^{11} \text{ atom}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$  的速率沉

积 Au 原子 [286]。通过拟合  $D$  对沉积时间（附着金原子的浓度）的依赖 [286]，我们得到附着的 Au 原子离石墨烯的距离为  $d_{\text{Au}} = 0.2 \text{ nm}$ 。但是，当沉积时间超过 4 s 后，拟合与实验数据符合得不好 [比较图 8-1 左图 (a) 中的拟合数据（带三角的链线）和实验数据（叉）]。这表明在沉积进行了一段时间后，附着原子的有效浓度不再随着时间线性增加。因此，当掺杂时间超过 4 s，我们选择合适的附着原子浓度来重复出实验上的扩散系数。在图 8-1 左图 (a) 中，带空心框的实线（刻度在图的右边框）代表 Au 浓度对沉积时间的依赖，而带实心框的短划线代表计算得到的扩散系数对沉积时间的依赖。

在得到了两种杂质的信息后，我们在不同的沉积时间拟合自旋弛豫时间  $\tau_s$  来得到该处的自旋轨道耦合系数  $\alpha_R$ 。在图 8-1 左图 (b) 中，我们以空心框的实线（刻度在图的右边）表示拟合得到的  $\alpha_R$  对沉积时间的依赖，同时以实心框的短划线表示计算得到的自旋弛豫时间对沉积时间的依赖。在图 8-1 左图 (b) 的插图中，我们进一步画出了自旋轨道耦合系数  $\alpha_R$  对 Au 的浓度  $N_{\text{Au}}$  的依赖。可以看见，在  $N_{\text{Au}}$  不是太大的时候， $\alpha_R$  随着它近似线性的增大。拟合得到的  $\alpha_R$  和 Ertler 等人在考虑进附着原子的影响时所估算得到的值，0.3 meV [247]，是可比的。同时，我们注意到，在  $N_{\text{Au}} = 0$  时， $\tau_p = \sqrt{N_e} \pi \frac{\hbar}{e v_F} \mu_e = 0.12 \text{ ps}$  [585]， $\alpha_R \tau_p / \hbar$  具有最大值  $0.027 \ll 1$ 。因此，电子系统处在强散射区（电子-杂质散射占主导），更不用说温度升高或者进行表面化学掺杂了。需要指出的是，在实验中，门电压  $V_g$  被调节，以保证在化学掺杂的过程中  $N_e$  保持不变，因为附着原子也会电离从而对石墨烯贡献电子 [286]。但是， $V_g$  不超过 200 V，而且  $\zeta E_z = \zeta V_g / a$  至少比  $\alpha_R$  小两个量级。因此  $\alpha_R \approx \eta$ ，仅仅由附着的 Au 原子和衬底决定。当  $N_{\text{Au}} = 0$  时， $\eta = 0.153 \text{ meV}$ ，单纯由衬底贡献。

## 8.4 自旋扩散和输运：只有弹性散射时的解析研究

### 8.4.1 自旋扩散

在这一小节，我们在只有电子-杂质散射的情况下，从解析上研究石墨烯中的自旋扩散。没有额外的施加电场。整个解析求解的过程和章节 4.2.1 里所给的过程完全类似（具体过程可参考文献 [450]），只不过要注意这里的电子具有线性能谱，Rashba 自旋轨道耦合不依赖动量的模长，以及还有一个谷简并度。我们在这里只把结果再呈现一遍。在下面的方程中， $\rho_{\mu k}^l(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}} \rho_{\mu \mathbf{k}}(x) e^{-i l \theta_{\mathbf{k}}}$  而  $\rho_{\mu \mathbf{k}}(x) \equiv \rho_{\mu \mathbf{k}}(x, t = +\infty)$ ，以及  $\mathbf{S}_{\mu k}^0(x) = \text{Tr}[\rho_{\mu k}^0(x) \mathbf{s}]$ 。

对于注入的自旋极化沿着  $x$  方向的情况，边界条件为 (I)  $\mathbf{S}_{\mu k}^0(0) = (S_{\mu k}^0(0), 0, 0)$  以及  $\mathbf{S}_{\mu k}^0(+\infty) = 0$ ，我们有解

$$\mathbf{S}(x) = S(0)e^{-x/l_x} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \Delta^2} \sin(\omega x + \phi) \\ 0 \\ c_1 \sin(\omega x) \end{pmatrix}. \quad (8.5)$$

对于注入的自旋极化沿着  $y$  方向的情况，边界条件为 (II)  $\mathbf{S}_{\mu k}^0(0) = (0, S_{\mu k}^0(0), 0)$  以及  $\mathbf{S}_{\mu k}^0(+\infty) = 0$ ，解为

$$\mathbf{S}(x) = S(0)e^{-x/l_y} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (8.6)$$

对于注入的自旋极化沿着  $z$  方向的情况，边界条件为 (III)  $\mathbf{S}_{\mu k}^0(0) = (0, 0, S_{\mu k}^0(0))$  以及  $\mathbf{S}_{\mu k}^0(+\infty) = 0$ ，解为

$$\mathbf{S}(x) = S(0)e^{-x/l_z} \begin{pmatrix} c_2 \sin(\omega x) \\ 0 \\ -\sqrt{1 + \Delta^2} \sin(\omega x - \phi) \end{pmatrix}. \quad (8.7)$$

在上面的方程中  $S(0) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} dk k S_{\mu k}^0(0)$ （考虑进了谷简并度），以及

$$l_x = l_z = \frac{\sqrt{7}}{(2\sqrt{2} - 1)\sqrt{1 + 2\sqrt{2}}} \frac{\hbar v_F}{\alpha_R}, \quad (8.8)$$

$$l_y = \frac{\hbar v_F}{2\alpha_R}, \quad (8.9)$$

$$\omega = \sqrt{1 + 2\sqrt{2}} \frac{\alpha_R}{\hbar v_F}. \quad (8.10)$$

其中  $c_1$ 、 $c_2$ 、 $\Delta$  以及  $\phi$  在章节 4.3.1 中已经给出。注意到在这个简单的近似模型中，自旋进动频率  $\omega \approx 1.96 \frac{\alpha_R}{\hbar v_F}$ ，比  $|\langle \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} \rangle| = \frac{2\alpha_R}{\hbar v_F}$  稍微小一些。

从方程 (8.5)-(8.7) 可以看出在强散射极限下，自旋扩散不仅对散射不敏感，而且与温度  $T$  和电子浓度  $N_e$  无关。然而，系数  $\alpha_R$  可能依赖于  $T$  和  $N_e$ 。为简单起见，我们假设  $\alpha_R$  与  $T$  和  $N_e$  无关。因此，在强散射极限，自旋扩散仅仅由  $\alpha_R$  决定，它受化学掺杂的调制。方程 (8.5)-(8.7) 表明自旋扩散对注入的自旋极化方向有强的各向异性。对于注入的自旋沿着  $x$  和  $z$  方向极化的情形，自旋信号一方面在幅度上体现指数的衰减，另一方面在  $x$ - $z$  平面内进动。两种情况下的解具有相同的进动频率  $\omega$ ，除了一个相位上的差别。但是，当注入的自旋沿着  $y$  方向极化时，自旋信号仅仅指数的衰减而没有进

动。也就是说，自旋极化被束缚在  $y$  方向。这些现象是由于扩散的电子感受到的平均有效磁场是沿着  $y$  方向，即  $\langle \omega_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{2\alpha_R}{\hbar v_F} (0, 1, 0)$  造成的。在非局域的自旋阀实验中，自旋扩散长度可以通过测量随自旋注入和探测的铁磁电极间的距离的增加而指数衰减的非局域电压信号得到 [238, 239]。在这些实验中，铁磁电极的磁矩恰好沿着  $y$  方向，因而注入的和探测的都是沿着  $y$  方向的极化。在这种构型下，探测端的电压信号随着铁磁电极距离增大而指数衰减的特点被很好的观察到。但是，当注入的自旋极化沿着  $x$ - $z$  平面时，我们期待空间上自旋信号的进动被探测到。

除了自旋进动的各向异性，自旋扩散长度也显现出各向异性，即  $l_x = l_z \approx 1.48l_y$ ，其中  $l_y = \hbar v_F / (2\alpha_R)$ 。事实上，当注入的自旋极化的方向沿着  $x$ - $z$  平面内的任何一个方向时，自旋扩散长度都等于  $l_x$  ( $l_z$ ) [在这种情况下， $\mathbf{S}(x)$  的解是方程 (8.5) 和 (8.7) 的组合]。但是，基于广泛应用的两分量漂移-扩散模型给出的结果 [8, 58, 59, 330, 586]， $l_s = \sqrt{D\tau_s}$ ，由时间域自旋弛豫的各向异性  $\tau_x = \tau_y = 2\tau_z = \hbar^2 / (2\alpha_R^2 \tau_p)$  以及关系  $D = v_F^2 \tau_p / 2$ ，人们会很容易以为自旋扩散长度具有  $l_x = l_y = \sqrt{2}l_z = \hbar v_F / (2\alpha_R)$  形式的各向异性。事实上，只有当注入的自旋沿着  $y$  方向极化时，自旋在空间没有进动，两分量的漂移-扩散模型才给出和动力学自旋 Bloch 方程一致的结果，也即  $l_y = \hbar v_F / (2\alpha_R)$ （在忽略自旋关联后，从动力学自旋 Bloch 方程可以得到两分量的漂移-扩散方程，见附录 ??）。动力学自旋 Bloch 方程和两分量的漂移-扩散模型给出的自旋扩散在各向异性上的不一致强烈表明了两分量的漂移-扩散模型的不足。由于没有考虑进自旋的相干，两分量的漂移-扩散模型不仅不能给出在没有外加磁场时自旋在实空间的进动，而且还不正确地时间域里自旋弛豫的各向异性推导出自旋扩散上的各向异性。在这里，们强调时间域里的自旋弛豫和空间域里的自旋扩散的不同的各向异性性质是由于两种情况下非均匀扩展很不一样造成的。在空间域支配自旋扩散的非均匀扩展来自动量依赖的  $\omega_{\mathbf{k}}$ ，而时间域里支配自旋弛豫的非均匀扩展来自动量依赖的  $\Omega_{\mathbf{k}}$ 。

### 8.4.2 自旋输运

我们进一步在  $x$  方向施加小的电场，研究自旋的输运。在解析上我们仍然只考虑强的电子-杂质散射。对应于方程 (4.38) 但是包含了电场驱动项的  $\rho_{\mu k}^0(x)$  的二阶微分方程为

$$\begin{aligned} & \partial_x^2 \rho_{\mu k}^0(x) + 2i\gamma [s_y, \partial_x \rho_{\mu k}^0(x)] - \gamma^2 [s_x, [s_x, \rho_{\mu k}^0(x)]] - \gamma^2 [s_y, [s_y, \rho_{\mu k}^0(x)]] - eE \partial_x \partial_{\varepsilon_{\mathbf{k}}} \rho_{\mu k}^0(x) \\ & - i\gamma eE [s_y, \partial_{\varepsilon_{\mathbf{k}}} \rho_{\mu k}^0(x)] = 0. \end{aligned} \quad (8.11)$$

这里  $\gamma = \alpha_R/(\hbar v_F)$ 。需要指出的是，为了得到上面的方程，在原始的动力学自旋 Bloch 方程中，我们在小电场下对电场驱动项做了如下近似，

$$\frac{eE}{\hbar} \frac{\partial \rho_{\mu\mathbf{k}}(x)}{\partial k_x} = \frac{eE}{\hbar} \frac{\partial \rho_{\mu\mathbf{k}}(x)}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \approx eE v_F \cos \theta_{\mathbf{k}} \frac{\partial \rho_{\mu\mathbf{k}}^0(x)}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (8.12)$$

当电场强度很大以至于在电场的驱动下  $\rho_{\mu\mathbf{k}}(x)$  具有明显的各向异性时，上面的处理不再合适。从方程 (8.11) 可以得到自旋极化矢量  $\mathbf{S}_{\mu\mathbf{k}}^0(x)$  满足的二阶微分方程

$$\begin{pmatrix} \partial_x^2 - eE\partial_x\partial_{\varepsilon_{\mathbf{k}}} - 4\gamma^2 & 0 & -4\gamma\partial_x + 2eE\gamma\partial_{\varepsilon_{\mathbf{k}}} \\ 0 & \partial_x^2 - eE\partial_x\partial_{\varepsilon_{\mathbf{k}}} - 4\gamma^2 & 0 \\ 4\gamma\partial_x - 2eE\gamma\partial_{\varepsilon_{\mathbf{k}}} & 0 & \partial_x^2 - eE\partial_x\partial_{\varepsilon_{\mathbf{k}}} - 8\gamma^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{\mu kx}^0(x) \\ S_{\mu ky}^0(x) \\ S_{\mu kz}^0(x) \end{pmatrix} = 0. \quad (8.13)$$

在有了求解方程 (4.39) 的经验后，我们假设  $\mathbf{S}_{\mu\mathbf{k}}^0(x)$  具有形如  $\mathbf{S}_{\mu\mathbf{k}}^0(x) = S_{\mu\mathbf{k}}^0(0)\mathbf{T}(x)$  的解。因此  $\mathbf{S}(x) = S(0)\mathbf{T}(x)$ 。将上面的方程对  $\mu$  和  $\mathbf{k}$  求和，并且利用技巧

$$\int_0^{+\infty} dk k [\partial_{\varepsilon_{\mathbf{k}}} S_{\mu\mathbf{k}}^0(0)] \mathbf{T}(x) = -\frac{\int_0^{+\infty} d\varepsilon_{\mathbf{k}} S_{\mu\mathbf{k}}^0(0)}{\hbar^2 v_F^2} \mathbf{T}(x) = -\frac{\frac{1}{\beta} \ln \frac{1+e^{\beta\mu_{\uparrow}}}{1+e^{\beta\mu_{\downarrow}}}}{S(0)\hbar^2 v_F^2} \mathbf{S}(x), \quad (8.14)$$

我们可以得到  $\mathbf{S}(x)$  满足的方程为

$$\begin{pmatrix} \partial_x^2 + \gamma\mathcal{E}\partial_x - 4\gamma^2 & 0 & -4\gamma\partial_x - 2\gamma^2\mathcal{E} \\ 0 & \partial_x^2 + \gamma\mathcal{E}\partial_x - 4\gamma^2 & 0 \\ 4\gamma\partial_x + 2\gamma^2\mathcal{E} & 0 & \partial_x^2 + \gamma\mathcal{E}\partial_x - 8\gamma^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_x(x) \\ S_y(x) \\ S_z(x) \end{pmatrix} = 0, \quad (8.15)$$

其中  $\mathcal{E} = \frac{eE}{S(0)\pi\alpha_R\beta\hbar v_F} \ln \frac{1+e^{\beta\mu_{\uparrow}}}{1+e^{\beta\mu_{\downarrow}}}$ 。  $\mu_{\uparrow}$  和  $\mu_{\downarrow}$  分别是自旋平行（反平行）于自旋极化方向的电子的化学势。在上一节中所给出的三种边界条件下， $\mathbf{S}(x)$  具有和方程 (8.5)-(8.7) 相同形式的解，除了一些参量现在变为

$$l'_x = l'_z = \frac{1}{\mathcal{E}/2 + F(\mathcal{E})} \frac{\hbar v_F}{\alpha_R}, \quad (8.16)$$

$$l'_y = \frac{1}{\mathcal{E}/2 + \sqrt{4 + \mathcal{E}^2/4}} \frac{\hbar v_F}{\alpha_R}, \quad (8.17)$$

$$\omega' = G(\mathcal{E}) \frac{\alpha_R}{\hbar v_F}, \quad (8.18)$$

$c'_1 = -\frac{1}{2} \frac{\sqrt{\mathcal{E}^4 + 48\mathcal{E}^2 + 512}}{\sqrt{\mathcal{E}^2 + 7F(\mathcal{E}) + 5G(\mathcal{E})}}$ ,  $c'_2 = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\mathcal{E}^4 + 48\mathcal{E}^2 + 512}}{\sqrt{\mathcal{E}^2 + 7F(\mathcal{E}) + 3G(\mathcal{E})}}$ ,  $\Delta' = \frac{5F(\mathcal{E}) - \sqrt{\mathcal{E}^2 + 7G(\mathcal{E})}}{\sqrt{\mathcal{E}^2 + 7F(\mathcal{E}) + 5G(\mathcal{E})}}$  以及  $\phi' = \arctan \frac{1}{\Delta'}$ 。在上面的方程中，

$$F(\mathcal{E}) = \frac{\sqrt{\mathcal{E}^4 + 48\mathcal{E}^2 + 512} + \mathcal{E}^2 - 8}{16\sqrt{2}\sqrt{\mathcal{E}^2 + 7}} \sqrt{\sqrt{\mathcal{E}^4 + 48\mathcal{E}^2 + 512} - \mathcal{E}^2 + 8}, \quad (8.19)$$

$$G(\mathcal{E}) = \sqrt{1 - \mathcal{E}^2/8 + \sqrt{\mathcal{E}^4 + 48\mathcal{E}^2 + 512}/8}. \quad (8.20)$$

注意到当电场不存在也即  $\mathcal{E} = 0$  时，上面的解回到前面所给出的无电场下自旋扩散的解。

在绝大多数情况下，石墨烯中的电子是高度简并的。在强简并，小极化下， $\mathcal{E} \approx \frac{eE}{\alpha_{\text{R}} k_{\text{F}}}$ ，其中  $k_{\text{F}} = \sqrt{\pi N_e}$  是无自旋极化的浓度为  $N_e$  的电子的费米动量。和无电场时的自旋扩散不一样，在有电场时的自旋输运对电子浓度有依赖，因为  $\mathcal{E}$  依赖于电子的浓度。在非简并极限下， $\mathcal{E} \approx \frac{eE\beta\hbar v_{\text{F}}}{\alpha_{\text{R}}}$ ，自旋输运对温度而不是浓度敏感。另外，此时方程 (8.17) 变为

$$l'_y = \left[ eE\beta/2 + \sqrt{e^2 E^2 \beta^2 / 4 + 1/l_y^2} \right]^{-1}, \quad (8.21)$$

这里  $l_y$  是前面给出的没有电场时候的自旋扩散长度。这个结果和两分量的漂移-扩散模型所给出的结果是一致的，因为这种情况下自旋极化在实空间没有进动。

在图 8-1 右图中，我们画出了  $l'_{x,y,z}$ ,  $\omega'$  以及  $\phi'$  对  $\mathcal{E}$  的依赖。从图 8-1 右图 (a) 可以看出，随着  $\mathcal{E}$  ( $\mathcal{E} \approx \frac{eE}{\alpha_{\text{R}} k_{\text{F}}}$ ) 的增加，自旋输运长度减小。一方面，这意味着，当电子浓度固定时（比如， $N_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ，那么  $\mathcal{E}$  从  $-8$  变到  $8$  时，对应电场从  $-2.2$  变到  $2.2 \text{ kV/cm}$ ），通过增加平行（反平行）于自旋注入方向的电场的强度，自旋输运可以被压制（加强）。另一方面，这也意味着，当平行（反平行）于自旋注入方向的电场固定时，自旋输运可以通过增加电子浓度来加强（压制）。图 8-1 右图 (b) 和 (c) 表明自旋进动频率  $\omega'$  和相位  $\phi'$  随着  $\mathcal{E}$  变化非常微弱（变化量  $\sim 2\%$ ）。事实上，如果  $|\mathcal{E}|$  变得更大， $\omega'$  和  $\phi'$  会迅速稳定（ $\omega'$  趋近于  $\frac{2\alpha_{\text{R}}}{\hbar v_{\text{F}}}$ ，而  $\phi'$  趋近于  $\pi/2$ ）。因此，自旋在输运过程中的自旋进动样式（频率和相位）对电场或者电子浓度都不敏感。

## 8.5 自旋扩散和输运：数值结果

为了将所有的不同散射以及大的电场考虑进来，我们完全数值的求解了动力学自旋 Bloch 方程。初始条件设为

$$\rho_{\mu\mathbf{k}}(0,0) = \frac{F_{\mathbf{k}\uparrow}^0 + F_{\mathbf{k}\downarrow}^0}{2} + \frac{F_{\mathbf{k}\uparrow}^0 - F_{\mathbf{k}\downarrow}^0}{2} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}, \quad (8.22)$$

$$\rho_{\mu\mathbf{k}}(x > 0, 0) = \frac{F_{\mathbf{k}\uparrow}^L + F_{\mathbf{k}\downarrow}^L}{2}, \quad (8.23)$$

$$\sum_{\mu\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mu\mathbf{k}}(0,0) \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}] / \sum_{\mu\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mu\mathbf{k}}(0,0)] = P_0, \quad (8.24)$$

以及双边的注入条件 [276, 493] 为

$$\rho_{\mu\mathbf{k}}(0, t)|_{k_x > 0} = \frac{F_{\mathbf{k}\uparrow}^0 + F_{\mathbf{k}\downarrow}^0}{2} + \frac{F_{\mathbf{k}\uparrow}^0 - F_{\mathbf{k}\downarrow}^0}{2} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}, \quad (8.25)$$

$$\rho_{\mu\mathbf{k}}(L, t)|_{k_x < 0} = \frac{F_{\mathbf{k}\uparrow}^L + F_{\mathbf{k}\downarrow}^L}{2}. \quad (8.26)$$

这里, 左边界  $x = 0$  处注入的自旋的极化沿着  $\hat{\mathbf{n}}$  方向, 具有极化度  $P_0 = 0.05$ 。  $x = L$  代表右边界, 且  $L$  远远大于自旋扩散或输运的长度。  $F_{\mathbf{k}\uparrow, \downarrow}^{0, L}$  是两个边界处的无电场情况下的费米分布。 当有电场存在时,  $F_{\mathbf{k}\uparrow, \downarrow}^{0, L}$  则代表漂移的费米分布 [246]。 在上面的解析解中, 边界条件实际上被近似成了单边注入的情形。 这个近似在强散射区是很好的 [276]。 通过数值求解动力学自旋 Bloch 方程, 可以得到稳态下沿着  $\hat{\mathbf{n}}$  方向自旋极化的空间分布  $P(x) = \sum_{\mu\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mu\mathbf{k}}(x, +\infty) \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}] / \sum_{\mu\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho_{\mu\mathbf{k}}(x, +\infty)]$ 。 从这个分布, 可以得到自旋沿着  $x$  方向的扩散或输运的长度。

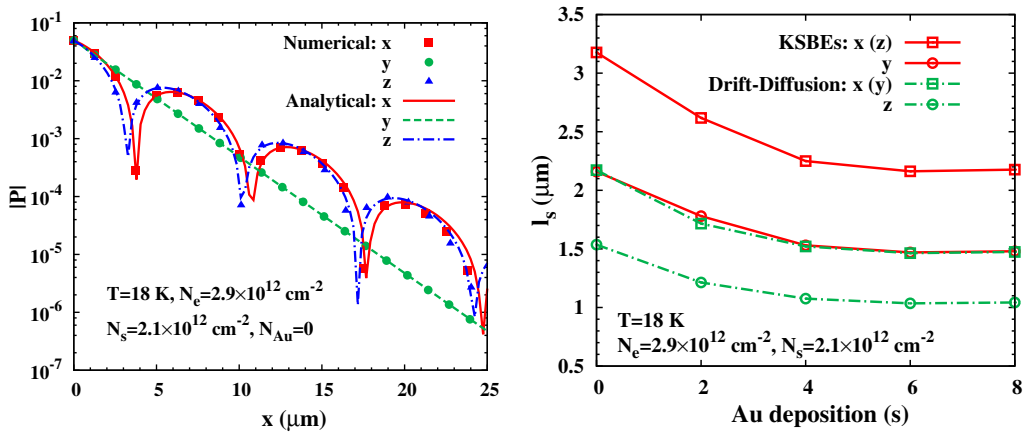


图 8-2: 左图: 在注入的自旋极化分别沿着  $x$ ,  $y$  和  $z$  方向时, 稳态下自旋极化的绝对值  $|P|$  随位置  $x$  的分布。方框、圆圈和三角是在  $T = 18\text{ K}$ ,  $N_e = 2.9 \times 10^{12}\text{ cm}^{-2}$ ,  $N_s = 2.1 \times 10^{12}\text{ cm}^{-2}$  以及  $N_{\text{Au}} = 0$  条件下的数值解。实线、短划线和链线分别是方程 (8.5)-(8.7) 得到的, 分别对应  $P(x) = S_x(x)/N_e$ ,  $S_y(x)/N_e$  以及  $S_z(x)/N_e$ 。右图: 在注入的自旋极化  $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{x}}$ ,  $\hat{\mathbf{y}}$  以及  $\hat{\mathbf{z}}$  的情形下, 自旋扩散长度对沉积时间的依赖。作为对比, 动力学自旋 Bloch 方程给出的结果 (实线) 和两分量漂移-扩散模型给出的结果 (链线) 都给出来了。

### 8.5.1 自旋扩散的各向异性

正如解析解所表明的那样, 自旋扩散对注入的自旋极化的方向有明显的各向异性依赖。在图 8-2 左图中, 我们在注入的自旋极化分别沿着  $x$ ,  $y$  和  $z$  方向时, 画出了稳态下自旋极化的绝对值  $|P|$  在实空间的分布。这时假设没有掺金,  $N_{\text{Au}} = 0$  以及  $\alpha_R = 0.153\text{ meV}$ 。方框、圆圈以及三角是从数值求解动力学自旋 Bloch 方程得到的结



果，而实线、短划线以及链线是由方程 (8.5)-(8.7) 给出的结果。当  $\alpha_R = 0.153 \text{ meV}$  时，解析模型给出  $l_x = l_z \approx 3.18 \text{ } \mu\text{m}$ ,  $l_y \approx 2.16 \text{ } \mu\text{m}$  以及  $\omega \approx 0.45 \text{ } \mu\text{m}^{-1}$ 。图 8-2 左图很清楚地表明了自旋扩散的各向异性。注意到简单的解析模型几乎完美地重复出了完整的数值解（除了对注入的自旋极化沿着  $x$  和  $z$  方向的情形，数值解给出的自旋进动频率更接近  $2\frac{\alpha_R}{\hbar v_F}$  而非解析解给出的  $1.96\frac{\alpha_R}{\hbar v_F}$ ）。事实上，数值上更多的计算表明当温度  $T$  从 18 增到 300 K 或者浓度  $N_e$  从 0.5 增到  $2.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  时，数值解的变化非常微弱。这和解析解给出的结论是一致的，也即，在强散射区，石墨烯中的自旋扩散对温度和电子浓度不敏感。因此，在强散射极限，我们可以用唯一的参数  $\alpha_R$ ，利用方程 (8.5)-(8.7) 很好地描述自旋的扩散。

### 8.5.2 自旋扩散对化学掺杂的依赖

在图 8-2 右图中，我们分别在  $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{x}}$ ,  $\hat{\mathbf{y}}$  以及  $\hat{\mathbf{z}}$  的情形下给出了自旋扩散长度对 Au 的沉积时间的依赖。自旋扩散长度由方程 (8.8)-(8.9) 直接给出。可以看见，随着化学掺杂时间的增加， $\alpha_R$  增大，而自旋扩散长度减小。作为比较，我们也画出了由两分量的漂移-扩散模型给出的自旋扩散长度， $l_x = l_y = \sqrt{2}l_z = \sqrt{D\tau_x}$ ，对沉积时间的依赖（链状线）。其中  $D$  和  $\tau_x$  在图 8-1 左图中给出。两组解的比较表明，只有当注入的自旋沿着  $y$  方向极化时，两分量的漂移-扩散模型才给出和动力学自旋 Bloch 方程一样的解，正如前面的解析研究中所揭示的。

### 8.5.3 散射对自旋扩散的影响

我们研究的电子系统始终处在强的散射极限，因而自旋扩散对散射不敏感。但是，在弱的散射极限，自旋扩散的性质可能会不一样。为了研究从弱散射极限到强散射极限的自旋扩散性质，我们人为假设衬底里的杂质浓度可以在 0 到  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  的范围内变化。同时，我们也没有进行化学掺杂， $\alpha_R$  取为常数 0.153 meV。我们取  $T = 50 \text{ K}$ ,  $N_e = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  以及  $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{y}}$ 。在图 8-3 左图中，我们用短划线代表自旋扩散长度  $l_y$  对杂质浓度的依赖。作为比较，对应的，我们也用实线画出了自旋弛豫时间  $\tau_y$  对杂质浓度的依赖（刻度在图的右边）。可以看见，随着  $N_s$  的增加， $l_y$  在弱散射极限 ( $N_s \lesssim 0.05 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) 明显地变小，之后达到稳定值不随  $N_s$  变化。 $\tau_y$  则先在弱散射区下降（细节参见插图），然后在强散射区随着杂质浓度几乎线性增大 [11]。两分量的漂移-扩散模型给出的关系， $l_y = \sqrt{D\tau_y}$ ，在这里能够解释自旋扩散长度对杂质浓度  $N_s$  的依赖：当  $D \propto \tau_p \propto 1/N_s$  时， $\tau_y$  在弱散射区随着  $N_s$  的增加而减小，但是在强散射区正比于  $N_s$ ；因而  $l_y$  首先随着  $N_s$  减小，而后对  $N_s$  不敏感（在之前的解析解中已经指出过）。

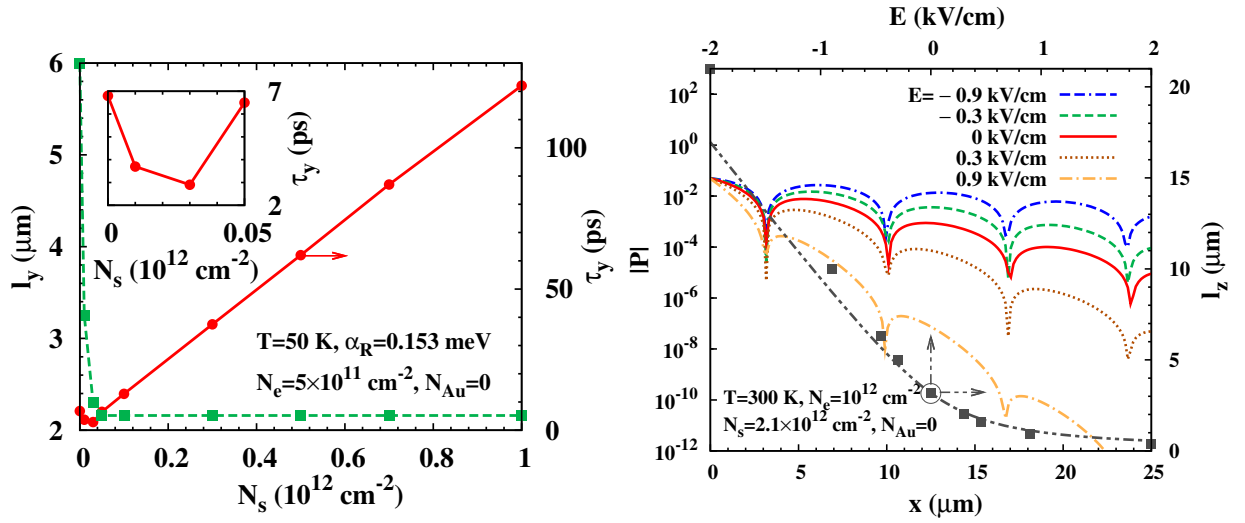


图 8-3: 左图: 自旋扩散长度 (短划线) 和自旋弛豫时间 (刻度在右边的实线) 对衬底杂质浓度的依赖。插图显示了在小杂质浓度范围内实线的细节。注入的自旋沿着  $y$  方向极化。  $T = 50 \text{ K}$ ,  $N_e = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  以及  $\alpha_R = 0.153 \text{ meV}$ 。右图: 不同的电场强度下, 稳态的自旋极化的绝对值  $|P|$  对空间位置  $x$  的依赖。自旋输运长度  $l_z$  对电场的依赖也被画出, 其坐标刻度在图的右边和上边。其中方框由数值计算得到, 而双点链状线由方程 (8.16) 给出。  $T = 300 \text{ K}$ ,  $N_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $N_s = 2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及  $N_{Au} = 0$ 。

### 8.5.4 电场下的自旋输运

最后我们研究在  $x$  方向施加电场后的自旋输运。我们取  $T = 300 \text{ K}$ ,  $N_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $N_s = 2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及  $N_{Au} = 0$ 。注入的自旋沿着  $z$  方向极化。在图 8-3 右图中, 我们画出了不同电场强度下  $|P|$  对位置的依赖以及  $l_z$  的电场依赖 (方框, 坐标尺度在图的右边和上边)。可以看见, 当电场  $E$  变化时, 自旋进动的样式基本没有变化。但是当沿着  $-x$  ( $x$ ) 方向的电场强度增加时, 自旋输运的长度增加 (减小) [276, 330]。这些结果和前面的解析解是一致的。作为对比, 我们进一步用双点短划线画出了由方程 (8.16) 给出的  $l_z$  对  $E$  的依赖关系 (坐标尺度在图的右边和上边)。可以看见, 解析模型可以比较好的描述低电场强度下的自旋输运。

我们还研究了自旋输运对电子浓度的依赖。在图 8-4 的 (a) 和 (b) 中, 我们分别画出了平行 ( $E = 0.3 \text{ kV/cm}$ ) 和反平行 ( $E = -0.3 \text{ kV/cm}$ ) 于自旋注入方向的电场下自旋输运长度对电子浓度的依赖。方框来自于数值计算, 而曲线来自于方程 (8.16)。可以明显地看到, 当电场方向相反时, 自旋输运对浓度的依赖具有相反的趋势。

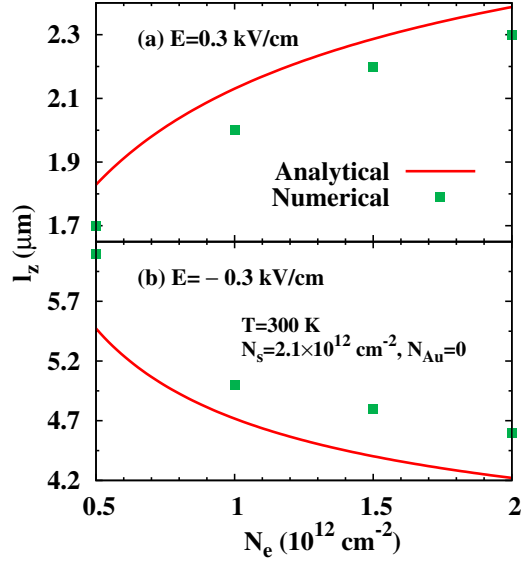


图 8-4: 在两个相反方向的电场下, 自旋输运长度  $l_z$  对电子浓度的依赖。(a)  $E = 0.3 \text{ kV/cm}$  以及 (b)  $E = -0.3 \text{ kV/cm}$ 。方框来自数值计算而曲线来自方程 (8.16)。  $T = 300 \text{ K}$ ,  $N_s = 2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  以及  $N_{\text{Au}} = 0$ 。

## 8.6 小结以及判定石墨烯中主要的自旋弛豫机制的可能方案

这一章里, 我们利用动力学自旋 Bloch 方程方法研究了  $\text{SiO}_2$  衬底上石墨烯里的自旋扩散和输运。我们假设衬底 (包括可能原生存在的附着原子) 贡献强的 Rashba 自旋轨道耦合, 它比受垂直门电压调制的那部分要强得多。通过表面化学掺杂 Au 原子, Rashba 自旋轨道耦合系数  $\alpha_R$  进一步增大 [286]。通过拟合扩散系数和自旋弛豫时间对化学掺杂的依赖, 我们得到杂质的信息以及  $\alpha_R$  对化学掺杂的依赖。我们的拟合发现随着附着原子 Au 的浓度的增大,  $\alpha_R$  接近线性的从 0.15 增大到 0.23 meV。利用通过拟合得到的必要的参量, 我们从解析和数值上研究了该样品中的自旋扩散和输运。

我们的研究表明, 在强散射极限下, 自旋扩散仅仅由 Rashba 自旋轨道耦合系数  $\alpha_R$  决定。当注入的自旋极化方向沿着  $x$ - $z$  平面时 ( $x$  是输运方向,  $z$  垂直于石墨烯平面), 自旋极化边进动边衰减, 且具有相同的自旋扩散长度; 但是当自旋极化方向沿着  $y$  方向时, 自旋进动消失。这些性质是不包含自旋相干项的两分量的漂移-扩散模型所不能给出的。我们还研究了在沿着自旋注入方向施加了电场后的自旋输运。施加电场后, 对于注入的自旋极化沿着  $x$  和  $z$  方向的情形, 自旋极化在空间的进动形式几乎不变, 但是自旋的输运长度在电场方向与自旋注入方向反平行 (平行) 时增大 (减小)。此外, 在有电场的情况下, 自旋的输运依赖于电子浓度和温度, 和无电场时的自旋扩散

的情形不一样。当电场方向与自旋注入方向平行（反平行）时，增加电子浓度会使自旋输运加强（压制）。

我们上面的研究基于 DP 的弛豫机制。在特定的情况，比如 Riverside 小组 Pi 等人掺金实验的样品中，目前比较合理的理解确实是基于 DP 机制。但是，正如在第 3 章所指出的，最近很多实验上的迹象却倾向于排除 DP 机制。因此，我们有必要在随机 Rashba 场导致的自旋翻转散射占主导的情况下考察石墨烯中自旋输运的性质。基于 DP 机制和这种类 EY 机制下自旋输运性质的不同，我们有可能提供从实验上确定石墨烯中占主导的自旋弛豫机制的方案。

我们排除掉 DP 机制，在石墨烯中研究随机 Rashba 场提供的自旋翻转散射下的自旋扩散。包含了自旋守恒的电子-杂质散射和自旋翻转散射的动力学自旋 Bloch 方程在稳态下可以写为

$$\begin{aligned} v_F \cos \theta_{\mathbf{k}} \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}(x)}{\partial x} + \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} |U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) [\rho_{\mathbf{k}}(x) - \rho_{\mathbf{k}'}(x)] \\ + \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) [\rho_{\mathbf{k}}(x) - V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}'}(x) V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}] = 0. \end{aligned} \quad (8.27)$$

定义自旋极化矢量  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(x) \equiv \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(x)\mathbf{s}]$ ，并且做关于角度  $\theta_{\mathbf{k}}$  的傅立叶变换，我们得到方程

$$\frac{v_F}{2} \partial_x \sum_{l_0=\pm 1} S_{kx}^{l+l_0}(x) + \left(\frac{1}{\tau_k^l} + \frac{1}{\tau_{ks}^0}\right) S_{kx}^l(x) + \sum_{l_0=\pm 1} \frac{S_{kx}^{l+2l_0}(x) + i^{l_0} S_{ky}^{l+2l_0}(x)}{2\tau_{ks}^{l+l_0}} = 0, \quad (8.28)$$

$$\frac{v_F}{2} \partial_x \sum_{l_0=\pm 1} S_{ky}^{l+l_0}(x) + \left(\frac{1}{\tau_k^l} + \frac{1}{\tau_{ks}^0}\right) S_{ky}^l(x) + \sum_{l_0=\pm 1} \frac{i^{l_0} S_{kx}^{l+2l_0}(x) - S_{ky}^{l+2l_0}(x)}{2\tau_{ks}^{l+l_0}} = 0, \quad (8.29)$$

$$\frac{v_F}{2} \partial_x \sum_{l_0=\pm 1} S_{kz}^{l+l_0}(x) + \left(\frac{1}{\tau_k^l} + \frac{2}{\tau_{ks}^0}\right) S_{ky}^l(x) = 0. \quad (8.30)$$

在上面的方程中， $\tau_{ks}^l$  和  $\tau_k^l$  由方程 (7.18) 和 (7.19) 给出。在强散射极限，保留  $l = 0, \pm 1$  的三阶，并且考虑到  $\tau_k^{\pm 1}/\tau_{ks}^0 \ll 1$  ( $\tau_{ks}^0 \sim$  自旋弛豫时间，在 10-1000 ps 的量级；而  $\tau_k^{\pm 1} \sim$  动量弛豫时间，在 0.01-0.1 ps 的量级)，我们得到  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}^0(x)$  所满足的方程

$$\frac{v_F^2 \tau_k^1}{2} \partial_x^2 S_{k\alpha}^0 - \frac{1 + \delta_{\alpha z}}{\tau_{ks}^0} S_{k\alpha}^0 = 0, \quad (8.31)$$

其中  $\alpha = x, y, z$ 。这个结果表明，不管注入的自旋极化沿什么方向，自旋极化信号在扩散过程中不会有空间上的进动，只有指数衰减，且具有扩散长度

$$l_x = l_y = \sqrt{2} l_z, \quad (8.32)$$

其中  $l_z = v_f \sqrt{\tau_k^1 \tau_{ks}^0} / 2$ 。考虑到在自旋翻转散射下石墨烯中沿着  $z$  方向的自旋弛豫时间为  $\tau_z = \tau_{ks}^0 / 2$  [方程 (7.25)] 以及扩散系数  $D = v_F^2 \tau_D / 2$  (附录 ??)，因而实际上我们有  $l_z = \sqrt{D \tau_z}$ 。我们还发现，当自旋极化在空间没有进动的时候，自旋扩散长度及其关于注入方向各向异性和漂移扩散模型给出的是一致的。

从上面的结果以及前面对 DP 机制下石墨烯中自旋输运的研究可以发现，类 EY 机制和 DP 机制下的自旋扩散性质很不一样。这些不同之处可以用来从实验上帮助确定主要的自旋弛豫机制。石墨烯中的大部分自旋输运实验都在  $z$  方向施加了外磁场进行 Hanle 效应的测量。这个外磁场会使问题复杂化。比如，DP 机制下自旋极化沿着  $x$  和  $y$  方向时候的自旋输运的各向异性会因  $z$  方向的磁场而降低；类 EY 机制下原本在空间上不会发生进动的自旋极化也会因为这个外磁场而发生进动。因此，为了让两种机制主导下的自旋输运的特有性质的差别更明显，以帮助确定主要的弛豫机制，我们不推荐做 Hanle 效应的测量。我们建议在非局域的四端自旋阀结构中，做非局域的电势对中间两个铁磁电极的间距的依赖性质的测量 [图 3-5(a) 的示意] [238, 239]，但是要将铁磁体的极化方向调整为和自旋输运的方向一致 (示意图见图 8-5)。在这种构型下，如果 DP 的自旋弛豫机制主导，那么应该能观察到非局域的电势随着中间两个铁磁电极的间距的变长而振荡衰减的信号；而如果是类 EY 的自旋弛豫机制主导，那么非局域的电势随着中间两个铁磁电极的间距的变长只有衰减，而没有振荡。

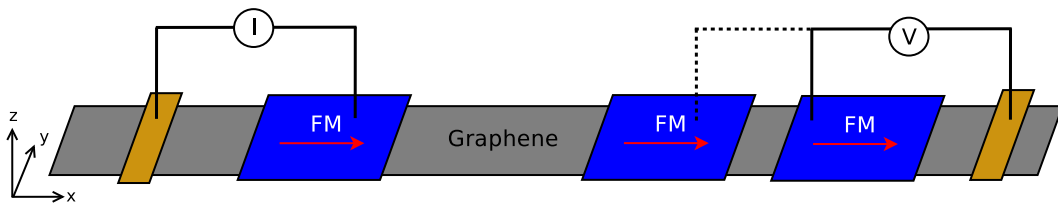


图 8-5: 非局域的四端自旋阀结构中，做非局域的电势对自旋输运距离的依赖的测量的示意图。铁磁体的极化方向调整为和自旋输运的方向一致。

## 第九章 拓扑绝缘体表面态的输运性质和自旋弛豫

### 9.1 研究背景

从章节 2.3 的介绍中我们知道，三维拓扑绝缘体的表面态具有自旋螺旋性。这种性质已经通过自旋-角度分辨的光电子谱实验验证 [154, 390]，但是还没有在输运实验中给出清楚的证据。部分原因在于，在输运中体态和表面态的载流子通常都会贡献电导，很难进行区分。此外，在输运中如果采用铁磁注入，来自铁磁电极的漏场也可能对输运造成影响。为了克服这些困难以验证拓扑绝缘体表面态的自旋-动量锁定性质，通过 Si 向拓扑绝缘体的表面注入自旋极化的电子的输运方案最近被提出来 [587]。尽管在实验上还有困难，但是理解拓扑绝缘体表面的电荷和自旋的输运性质是非常必要的。事实上，这个问题在理论上已经有了一些初步的研究。这些研究发现，在电场的驱动或者浓度梯度造成的扩散下，由于自旋-动量的锁定，可以产生横向的自旋极化 [149, 588, 589]，其幅度正比于电场强度和动量散射时间 [149, 589]。此外，同样是由于自旋-动量锁定，在电场撤掉后，自旋极化在动量弛豫时间的尺度内就弛豫掉了 [588, 590]。但是，这些研究所考虑的电场非常小 ( $\sim 0.1$  kV/cm [149, 589]，在这小电场下电子处在近平衡态)，而且费米面处在导带中很高的位置从而将完全占据的价带忽略 [149, 588-590]。此外，即使是在 Culcer 等人的基于动力学方程的微观研究中，也只有电子-杂质散射被考虑 [589]。可能会比较重要的电子-声子散射 [591]，以及电子-电子库仑散射，都没有被包含进来。

高电场下（达到几个 kV/cm）拓扑绝缘体表面远离平衡 [506, 592] 的电荷和自旋的输运目前还很少被研究。在这一章中，我们在  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的表面上研究这个问题。 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  在布里渊区中心有约 300 meV 的直接带隙。虽然通常情况下由于 Se 的空位的影响， $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  是  $n$  型的，但是在 Ca 的反掺杂下，电子浓度可以被调节 [150, 389, 593]。在这个系统中，除了极低温的情形，电子-表面光学声子散射占主导。我们的研究发现，由于导带和价带里自旋的混合，电场不仅在各个带中加速电子，而且还导致带间的进动。在电场存在的情况下，电子可以通过带间电声散射和带间进动从价带转移到导带。当电场很强的时候，各个带的电子浓度随着电场线性变化。由于自旋-动量锁定，电场导致横向的自旋极化，其大小正比于动量散射时间（和已有的研究一致）。当电场很小的时候，这个自旋极化对电场线性依赖。此外，在高温下，电场导致的自旋极化的大小与温度成反比，而对电子浓度不敏感。由于大的相对的静态介电常数，库仑散射很弱，不能在电场下建立具有统一的热电子温度的漂移费米分布。在系统达到平衡后去掉电

场，热化的载流子逐渐冷却到平衡态，这个能量弛豫所需要的时间是 100-1000 ps。与此同时，自旋极化在动量散射的时间尺度内弛豫掉，只需要 0.01-0.1 ps 的时间。

## 9.2 模型

我们设定  $z$  轴沿着  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的 (001) 方向。在  $\Gamma$  点附近，低能的 (001) 表面态用 Rashba 自旋轨道耦合 [66] 描述 [146, 398, 399],

$$H_0 = \hbar v_f (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (9.1)$$

这里费米速度  $v_f \approx 5 \times 10^5$  m/s [146, 151]。单电子哈密顿量的本征态记为  $|\mathbf{k}\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\pm ie^{-i\theta_{\mathbf{k}}}|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$  ( $\theta_{\mathbf{k}}$  是动量  $\mathbf{k}$  的幅角)，相应的本征能量为  $\varepsilon_{\mathbf{k}\pm} = \pm \hbar v_f k$ ，分别代表导带和价带的色散关系。

在我们研究的系统中，电子处在  $v_f \langle k\tau_k \rangle \gg 1$  ( $\tau_k$  是动量散射时间) 的弱散射区。我们应用动力学自旋 Bloch 方程来研究电荷和自旋的动力学。在  $\{|\mathbf{k}+\rangle, |\mathbf{k}-\rangle\}$  构成的 helix 自旋空间 [570]，动力学自旋 Bloch 方程可以写为 [参考方程 (4.14)] [11, 570]

$$\partial_t \rho_{\mathbf{k}}(t) + i[v_f k \sigma_z, \rho_{\mathbf{k}}(t)] - (eE/\hbar) \partial_{k_x} \rho_{\mathbf{k}}(t) - (eE/\hbar) [U_{\mathbf{k}}^\dagger \partial_{k_x} U_{\mathbf{k}}, \rho_{\mathbf{k}}(t)] + \partial_t \rho_{\mathbf{k}}(t)|_{\text{scat}} = 0. \quad (9.2)$$

这里  $\rho_{\mathbf{k}}(t)$  是 helix 自旋空间的  $2 \times 2$  的密度矩阵。注意在 helix 自旋空间，沿着  $x$  方向的电场  $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{x}}$  有两项贡献：等号左边的第三项在每个带内加速电子，而第四项，其中

$$U_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} ie^{-i\theta_{\mathbf{k}}} & -ie^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (9.3)$$

以及  $U_{\mathbf{k}}^\dagger \partial_{k_x} U_{\mathbf{k}} = \frac{i \sin \theta_{\mathbf{k}}}{2k} (1 - \sigma_x)$ ，导致带间的进动。这个电场导致的带间进动来自导带和价带的自旋混合。事实上，这个效应在石墨烯中也存在，因为石墨烯中导带和价带的赝自旋是混合的。Balev 等人对石墨烯的研究中指出了这一点 [594]。但是在他们的研究中，电场很低 ( $\sim 0.01$  kV/cm)，带间的关联被忽略了，电场的进动效应也没考虑 [594]。在这里，我们保留电场的进动项，而且会发现它对输运性质有重要的影响。动力学自旋 Bloch 方程中的散射项可以写为

$$\partial_t \rho_{\mathbf{k}}(t)|_{\text{scat}} = S_{\mathbf{k}}(>, <) - S_{\mathbf{k}}(<, >) + S_{\mathbf{k}}^\dagger(>, <) - S_{\mathbf{k}}^\dagger(<, >), \quad (9.4)$$

这里  $S_{\mathbf{k}}(>, <) = S_{\mathbf{k}}^{\text{ep}}(>, <) + S_{\mathbf{k}}^{\text{ei}}(>, <) + S_{\mathbf{k}}^{\text{ee}}(>, <)$ , 分别来自电子-表面光学声子, 电子-杂质, 以及电子-电子散射。其中,

$$S_{\mathbf{k}}^{\text{ep}}(>, <) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'\eta_1\eta_2} |g_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}'}^>(t) T_{\eta_1} \Lambda_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} T_{\eta_2} \rho_{\mathbf{k}}^<(t) [N_0^< \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'\eta_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}\eta_2} - \hbar\omega_0) + N_0^> \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'\eta_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}\eta_2} + \hbar\omega_0)], \quad (9.5)$$

$$S_{\mathbf{k}}^{\text{ei}}(>, <) = \frac{\pi n_i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'\eta_1\eta_2} |D_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}'}^>(t) T_{\eta_1} \Lambda_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} T_{\eta_2} \rho_{\mathbf{k}}^<(t) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'\eta_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}\eta_2}), \quad (9.6)$$

$$S_{\mathbf{k}}^{\text{ee}}(>, <) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'\eta_1\eta_2} \Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}'}^>(t) T_{\eta_1} \Lambda_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} T_{\eta_2} \rho_{\mathbf{k}}^<(t) \sum_{\mathbf{q}\eta_3-\eta_6} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^r(\varepsilon_{\mathbf{q}\eta_3} - \varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}'-\mathbf{k}\eta_4}) \times V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^a(\varepsilon_{\mathbf{q}\eta_5} - \varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}'-\mathbf{k}\eta_6}) \text{Tr}[\Lambda_{\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{k}'-\mathbf{k}} T_{\eta_6} \rho_{\mathbf{q}+\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^<(t) T_{\eta_4} \Lambda_{\mathbf{q}+\mathbf{k}'-\mathbf{k},\mathbf{q}} T_{\eta_3} \rho_{\mathbf{q}}^>(t) T_{\eta_5}] \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'\eta_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}\eta_2} + \varepsilon_{\mathbf{q}\eta_5} - \varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}'-\mathbf{k}\eta_6}). \quad (9.7)$$

在上面的方程中,  $\Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = U_{\mathbf{k}}^\dagger U_{\mathbf{k}'}$ ,  $T_{\eta_i} = \frac{1}{2}(1 + \eta_i \sigma_z)$  ( $\eta_i = \pm$ )。  $N_0$  是表面光学声子的玻色分布, 声子的能量是  $\hbar\omega_0 = 7.4 \text{ meV}$  [591]。电子-表面光学声子的散射矩阵元

$$|g_{\mathbf{q}}|^2 \approx (\lambda_1 + \lambda_2 q)^2 \hbar / (2M\mathfrak{A}\omega_0), \quad (9.8)$$

这里  $M$  是离子实的质量,  $\mathfrak{A}$  是原胞的面积 [ $\hbar^2/(M\mathfrak{A}) = 4 \times 10^{-3} \text{ meV}$ ],  $\lambda_1 \approx 5 \text{ eV}\cdot\text{nm}$  以及  $\lambda_2 \approx 1.6 \text{ eV}\cdot\text{nm}^2$  [591]。在我们的研究中, 所涉及的最大的动量变化  $q$  在  $0.1\text{-}1 \text{ nm}^{-1}$  的量级, 因而在大的  $\lambda_1$  下,  $|g_{\mathbf{q}}|^2$  对动量的依赖很微弱。电子-杂质散射的矩阵元  $|D_{\mathbf{q}}|^2 = |Z_i V_q^0 e^{-qd} / \epsilon(\mathbf{q}, 0)|^2$ , 我们假设杂质的电荷数  $Z_i$  为 1, 同时和 Culcer 等人一样将杂质到表面二维电子气的有效距离  $d$  近似为零。  $V_q^0 = 2\pi\hbar v_f r_s / q$ , 其中  $r_s = e^2 / (4\pi\epsilon_0 \kappa_0 \hbar v_f)$ 。对于  $\text{Be}_2\text{Se}_3$ , 文献给出的相对的静态介电常数在  $50 \sim 200$  之间变化 [595, 596]。和文献 [155, 589] 一样, 我们取  $\kappa_0 = 100$ 。在方程 (9.7) 中,  $V_{\mathbf{q}}^r(\hbar\omega) = V_{\mathbf{q}}^0 / \epsilon(\mathbf{q}, \omega)$  以及  $V_{\mathbf{q}}^a(\hbar\omega) = V_{\mathbf{q}}^{r*}(\hbar\omega)$ , 分别是动态屏蔽下的推迟和超前库仑势。RPA 动态屏蔽  $\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - V_{\mathbf{q}}^0 \Pi(\mathbf{q}, \omega)$  [584, 589, 597], 其中

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}\eta_1\eta_2} \frac{f_{\mathbf{k}\eta_1} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\eta_2}}{\hbar\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}\eta_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\eta_2} + i0^+} \frac{1 + \eta_1\eta_2 \cos(\theta_{\mathbf{k}} - \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{2}. \quad (9.9)$$

在  $n$  型简并 (本征非简并) 情形, 在长波和静态极限下, 将上面方程中的电子分布取为平衡的费米分布, 则有  $\Pi(0, 0) = -k_f / (2\pi\hbar v_f)$  [589] [ $\Pi(0, 0) = -k_B T \ln 4 / (2\pi\hbar^2 v_f^2)$ ] 且  $\epsilon(0, 0) = 1 + q_s / q$ , 其中  $q_s = r_s k_f$  ( $q_s = r_s k_B T \ln 4 / \hbar v_f$ )。特别地, 对于本征的情形, 由于大的费米速度和小的  $r_s$  (对应于  $\kappa_0 = 100$ ,  $r_s \approx 0.044$ ), 屏蔽非常弱, 我们可以进一步近似  $\epsilon(0, 0) \approx 1$ 。这些关于屏蔽的近似在下面的解析研究中计算电子-杂质的动量散射率的时候会用到。



通过求解电场下的动力学自旋 Bloch 方程，我们研究  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  表面的电荷和自旋的输运。两个带中电子和空穴的浓度分别为  $n_e = \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}+}$  和  $n_h = \sum_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}-})$ 。在 collinear 自旋空间，电场导致的自旋极化为

$$\tilde{\mathbf{S}} = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar}{2} \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[\tilde{\rho}_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\sigma}], \quad (9.10)$$

这里  $\tilde{\rho}_{\mathbf{k}} = U_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}^\dagger$  是 collinear 自旋空间的电子密度矩阵。由于 Rashba 自旋轨道耦合，电场下沿着  $x$  方向电流为

$$\tilde{j}_x = ev_f \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[\tilde{\rho}_{\mathbf{k}} \sigma_y] = 2ev_f \tilde{S}_y / \hbar, \quad (9.11)$$

和电场导致的自旋极化成正比。这是因为  $x$  方向的流算符  $\hat{j}_x = ev_f \sigma_y$ 。从电场下系统达到的平衡态出发，去掉电场，我们可以进一步研究热化了的载流子的冷却和自旋极化的弛豫。下面，我们先在低电场区解析研究，然后在高电场区数值研究。

### 9.3 低电场下只有弹性散射的解析研究

在小电场 ( $eE\langle\tau_k\rangle \ll \hbar\langle k\rangle$ ) 下，动力学自旋 Bloch 方程可以在只有弹性散射比如电子-杂质散射的情况下解析求解。由于表面光学声子的低能量，我们也可以把电子-光学声子散射做弹性散射近似。因此，在有电子-杂质和电子-声子散射的情况下，散射项可以简化为

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{\mathbf{k}}(t)|_{\text{scat}} = & \frac{k}{8\pi\hbar^2 v_f} \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}'} [n_i |D_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 + (2N_0 + 1) |g_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2] \left\{ 2[1 + \cos(\theta_{\mathbf{k}} - \theta_{\mathbf{k}'})] \right. \\ & \left. \times [\rho_{\mathbf{k}}(t) - \rho_{\mathbf{k}'}(t)] + i \sin(\theta_{\mathbf{k}} - \theta_{\mathbf{k}'}) [\rho_{\mathbf{k}}(t) - \rho_{\mathbf{k}'}(t), \sigma_x] \right\} \Big|_{\mathbf{k}'=\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (9.12)$$

注意到在这个方程中， $|\theta_{\mathbf{k}} - \theta_{\mathbf{k}'}| = \pi$  的项的贡献为零，表明了能量守恒散射中背散射的禁戒。

对动力学自旋 Bloch 方程做关于  $\theta_{\mathbf{k}}$  的傅立叶变换，并定义

$$\mathbf{S}_{\mathbf{k}}^l(t) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}} e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \text{Tr}[\frac{\hbar}{2} \rho_{\mathbf{k}}(t) \boldsymbol{\sigma}], \quad (9.13)$$

我们有

$$\partial_t \mathbf{S}_{\mathbf{k}}^l(t) + 2v_f k \mathbf{S}_{\mathbf{k}}^l(t) \times \hat{\mathbf{z}} + \frac{\mathbf{S}_{\mathbf{k}}^l(t)}{\tau_{1k}^l} - \frac{i\mathbf{S}_{\mathbf{k}}^l(t) \times \hat{\mathbf{x}}}{\tau_{2k}^l} - \frac{eE\delta_{l,\pm 1}\Delta_k^1 \hat{\mathbf{z}}}{4} - \frac{ieEl\delta_{l,\pm 1}\Delta_k^0 k^{-1} \hat{\mathbf{y}}}{4} = 0. \quad (9.14)$$

这里  $\Delta_k^0 = f_{\mathbf{k}+}(0) - f_{\mathbf{k}-}(0)$ ,  $\Delta_k^1 = \partial_k \Delta_k^0$ , 以及动量散射率

$$\frac{1}{\tau_{1k}^l} = \frac{k}{4\pi\hbar^2 v_f} \int_0^{2\pi} d\theta [n_i |D_{\mathbf{q}}|^2 + (2N_0 + 1)|g_{\mathbf{q}}|^2] (1 + \cos\theta)(1 - \cos l\theta), \quad (9.15)$$

$$\frac{1}{\tau_{2k}^l} = \frac{k}{4\pi\hbar^2 v_f} \int_0^{2\pi} d\theta [n_i |D_{\mathbf{q}}|^2 + (2N_0 + 1)|g_{\mathbf{q}}|^2] \sin\theta \sin l\theta. \quad (9.16)$$

为了得到方程 (9.14), 在小电场下, 我们将方程 (9.2) 中成正比于电场  $E$  的项中的密度矩阵  $\rho_{\mathbf{k}}(t)$  用初始时刻平衡态下的密度矩阵  $\rho_{\mathbf{k}}(0) = \text{diag}\{f_{\mathbf{k}+}(0), f_{\mathbf{k}-}(0)\}$  代替。这里  $f_{\mathbf{k}\pm}(0) = 1/\{\exp[\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}\pm} - \mu)] + 1\}$  是费米分布,  $\beta = 1/(k_B T)$  而  $\mu$  是化学势。同时, 我们还在长波和静态极限下处理屏蔽使得  $|D_{\mathbf{q}}|^2$  只依赖于  $\mathbf{q}$  ( $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ ) 的模而不依赖于其方向。在简并和非简并极限下,  $|D_{\mathbf{q}}|^2 \propto k^{-2}$ , 因而由电子-杂质散射决定的动量散射率  $\propto k^{-1}$ 。但是, 对于电子-声子散射,  $|g_{\mathbf{q}}|^2 \approx |g_0|^2 \equiv |g_{\mathbf{q}=0}|^2$ , 动量散射率  $\propto k$ 。

### 9.3.1 电场导致的自旋极化

保留方程 (9.14) 中关于  $\mathbf{S}_k^l$  的  $l = 0, \pm 1$  的最低三阶, 我们可以得到稳态的解

$$\mathbf{S}_k^0(+\infty) = (0, 0, \hbar\Delta_k^0/2), \quad (9.17)$$

$$S_{kx}^{\pm 1}(+\infty) = \frac{\mp ieE}{8v_f k} (\Delta_k^0 k^{-1} + \Delta_k^1), \quad (9.18)$$

$$S_{ky}^{\pm 1}(+\infty) = \frac{\pm ieE}{16(v_f k)^2 \tau_k} (\Delta_k^0 k^{-1} + \Delta_k^1), \quad (9.19)$$

$$S_{kz}^{\pm 1}(+\infty) = \frac{eE\tau_k}{4} \left[ \Delta_k^1 + \frac{\Delta_k^0 k^{-1} + \Delta_k^1}{4(v_f k \tau_k)^2} \right], \quad (9.20)$$

这里  $\tau_k \equiv \tau_{1k}^1 = \tau_{2k}^1$ 。在弱散射极限  $v_f \langle k\tau_k \rangle \gg 1$  下,  $\mathbf{S}_k^{\pm 1}(+\infty)$  可以被近似为  $\mathbf{S}_k^{\pm 1}(+\infty) \approx eE\tau_k \Delta_k^1 \hat{\mathbf{z}}/4$ 。稳态解  $S_{kz}^0(+\infty) = S_{kz}^0(0)$  意味着在这个小电场的解析框架下, 各个带内的电子浓度保持不变。

现在我们考察稳态下 collinear 自旋空间的自旋极化。根据方程 (9.10), 自旋极化为  $\tilde{\mathbf{S}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk k \tilde{\mathbf{S}}_k^0$ , 其中

$$\tilde{\mathbf{S}}_k^0 = (-\text{Im}S_{kz}^1 + \text{Re}S_{ky}^1, -\text{Im}S_{ky}^1 - \text{Re}S_{kz}^1, -S_{kx}^0). \quad (9.21)$$

利用  $\mathbf{S}_k^{0,1}(+\infty)$  的解, 我们有

$$\tilde{\mathbf{S}}_k^0(+\infty) \approx -eE\tau_k \Delta_k^1 \hat{\mathbf{y}}/4. \quad (9.22)$$

因此, 总的自旋极化  $\tilde{\mathbf{S}}(+\infty) \approx eE \langle \tau_k \rangle \ln(2 + e^{\beta\mu} + e^{-\beta\mu}) \hat{\mathbf{y}} / (8\pi\beta\hbar v_f)$ , 其中  $\langle \tau_k \rangle \equiv \int_0^{+\infty} dk k \Delta_k^1 \tau_k / \int_0^{+\infty} dk k \Delta_k^1$ 。对于本征的非简并情形,  $\mu = 0$ ,  $\tilde{\mathbf{S}}(+\infty) \approx \frac{eE \langle \tau_k \rangle \ln 4}{8\pi\beta\hbar v_f} \hat{\mathbf{y}}$ 。

对于  $n$  型的简并情形,  $\tilde{\mathbf{S}}(+\infty) \approx \frac{eE\tau_k k_f}{8\pi} \hat{\mathbf{y}}$ , 其中  $k_f$  是费米动量。对于简并情况, 我们得到的自旋极化和文献 [149] 中所给的一致。这些结果表明, 在小电场下, 由于 Rashba 自旋轨道耦合导致的动量-自旋锁定, 横向的自旋极化得以产生, 其大小正比于电场和动量散射时间。

我们进一步借助方程 (9.15)-(9.16), 在本征的非简并和  $n$  型的简并情形下分别研究动量散射时间。对于本征情形, 由电子-杂质和电子-声子散射贡献的动量散射时间分别为  $\langle \tau_k^{\text{ei}} \rangle \approx 8\beta\hbar n_e / (\pi r_s^2 n_i \ln 4)$  和  $\langle \tau_k^{\text{ep}} \rangle \approx 4\beta\hbar^3 v_f^2 / [(2N_0 + 1)|g_0|^2 \ln 4]$ 。对于  $n$  型情况, 在费米面上  $\tau_{k_f}^{\text{ei}} \approx k_f / [\pi r_s^2 v_f n_i I(r_s)]$  以及  $\tau_{k_f}^{\text{ep}} \approx 4\hbar^2 v_f / [(2N_0 + 1)|g_0|^2 k_f]$ 。这里  $I(r_s) \equiv \int_0^{2\pi} d\theta \sin^2 \theta / (2 \sin \frac{\theta}{2} + r_s)^2$ 。为了计算电声散射贡献的动量弛豫时间, 我们忽略了  $|g_q|^2$  弱的动量依赖, 将其近似为  $|g_0|^2$ 。

最后总的来说, 受电子-杂质散射限制的自旋极化, 对于本征的非简并情形, 为  $\tilde{\mathbf{S}}^{\text{ei}}(+\infty) \approx \frac{eEn_e}{\pi^2 r_s^2 v_f n_i} \hat{\mathbf{y}}$ , 而对于  $n$  型的简并情形, 为  $\tilde{\mathbf{S}}^{\text{ei}}(+\infty) \approx \frac{eEn_e}{2\pi v_f r_s^2 I(r_s) n_i} \hat{\mathbf{y}}$ 。但是, 由电子-声子散射限制的自旋极化, 不管是非简并的还是简并的情形, 都有  $\tilde{\mathbf{S}}^{\text{ep}}(+\infty) \approx eE\hbar^2 v_f \hat{\mathbf{y}} / [2\pi |g_0|^2 (2N_0 + 1)]$ 。考虑进这两种散射, 电场在  $y$  方向诱导的自旋极化为

$$\tilde{S}_y(+\infty) \approx [1/\tilde{S}_y^{\text{ei}}(+\infty) + 1/\tilde{S}_y^{\text{ep}}(+\infty)]^{-1} = \frac{E \cdot 10^{12} \text{ cm/kV}}{\alpha_1(2N_0 + 1) + \alpha_2 n_i / n_e} \hbar \cdot \text{cm}^{-2}, \quad (9.23)$$

其中  $\alpha_1 \approx 13$ 。对于本征的非简并情形 ( $n$  型的简并情形),  $\alpha_2 \approx 0.6$  (1)。非常有趣的是, 当电子-声子散射主导时, 电场诱导的自旋极化只对温度敏感。特别地, 在  $T \gg \hbar\omega_0/k_B \approx 90 \text{ K}$  的高温下, 我们有  $\tilde{S}_y(+\infty) \propto T^{-1}$ , 对电子浓度不敏感。由于大的相对的静态介电常数, 只有当杂质浓度足够高 (比如,  $n_i \gtrsim 10n_e$ ) 以及温度低的时候, 电子-杂质散射才和电子-声子散射可比, 从而导致自旋极化对杂质/电子浓度的依赖。

### 9.3.2 无电场下的自旋弛豫

我们接着从上面得到的稳态出发, 关掉电场, 研究自旋的弛豫。从 helix 表象下的初态  $\mathbf{S}_k^{0,1}(0) = S_{k_z}^{0,1}(0)\hat{\mathbf{z}}$  出发, 我们从方程 (9.14) (去掉电场相关的项) 求解  $\mathbf{S}_k^{0,1}(t)$  的时间演化。接着根据方程 (9.21), 我们得到 collinear 表象下的自旋极化  $\tilde{\mathbf{S}}_k^0(t) = \tilde{S}_{k_y}^0(t)\hat{\mathbf{y}}$ , 其中

$$\tilde{S}_{k_y}^0(t) = \tilde{S}_{k_y}^0(0)e^{-t/\tau_k} \left[ 1 - c_k^{-2} \left( 1 - c_k \sin \frac{c_k t}{\tau_k} - \cos \frac{c_k t}{\tau_k} \right) \right]. \quad (9.24)$$

这里  $\tilde{S}_{k_y}^0(0) = -S_{k_z}^1(0)$  以及  $c_k = \sqrt{(2v_f k \tau_k)^2 - 1}$ 。在弱散射极限下  $c_k \gg 1$ , 因而  $\tilde{S}_{k_y}^0(t) \approx \tilde{S}_{k_y}^0(0)e^{-t/\tau_k}$ , 表明自旋极化在动量散射的时间尺度内弛豫。这个特性和 Schwab 等人 [588] 以及 Burkov 和 Hawthorn [590] 所指出的是一致的。

## 9.4 数值结果

上面的解析解只对小的电场区适用。为了讨论大电场的情况，以及严格地考虑所有的散射，我们数值求解动力学自旋 Bloch 方程。在我们的计算中，我们首先沿  $x$  方向施加电场研究电荷和自旋的输运，然后在达到稳态后关掉电场，考察热化的电子的冷却和诱导的自旋极化的弛豫。我们考虑本征的非简并情况以及  $n$  型的简并情况。对于前者，我们的研究从  $\mu = 0$  的初态出发，对于后者，我们的研究从给定电子浓度  $n_e(0)$  的初态出发。 $n_e(0)$  被选择为  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$  的量级或者更小，以避免在高电场下电子进入体态，同时保证忽略了动量二阶或者三阶项 [参考方程 (2.80)] 的描述低能电子的有效哈密顿量能够适用 [399, 589]。我们不讨论低温下的本征情形，因为这种情形下载流子浓度很低，涨落效应 [155] 会变得很重要。这个情况超出我们的研究范围。

### 9.4.1 电子在两个带间的重新分布

在具有大带隙的半导体中，在静电场下，导带电子和价带空穴的浓度保持不变。但是，在拓扑绝缘体的表面，由于两个带中的自旋混合，静电场会导致带间的进动 [594]，同时由于零带隙，跨带的电声散射很容易发生。因此，在电场的作用下，电子可以很容易的从价带转移到导带，而电子-空穴的浓度差， $n_e - n_h$ ，由于粒子数守恒则保持不变。这种电场下电子在两个带间的重新布居在无带隙的石墨烯中也被研究过 [594]。原则上，库仑散射的俄歇过程（有且仅有一个电子跨带的库仑散射） [598, 599]，也可能在两个带间导致电子数的重新分布。但是，在 RPA 动态屏蔽下，这个过程实际上是被禁戒的 [246, 492]。电子在两个带间的重新分布不能由前面的解析解给出。这是因为解析解中没有包含带间的进动效应 [含电场的项中  $\rho_{\mathbf{k}}(t)$  被近似为  $\rho_{\mathbf{k}}(0)$ ]，以及跨带的散射也没有被考虑（由于弹性散射近似）。但是，完整地数值求解动力学自旋 Bloch 方程，可以体现电子在两带间的重新布居。

我们以  $T = 50 \text{ K}$  下  $n_e(0) = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  的  $n$  型简并情况（对应的费米能  $\varepsilon_f \approx 12 \text{ meV}$  以及费米动量  $k_f \approx 0.035 \text{ nm}^{-1}$ ）为例，展示电场强度  $E = 0.1 \text{ kV/cm}$  下导带电子浓度的相对变化， $n_e(t)/n_e(0) - 1$ ，随时间的演化。从图 9-1(a) 可以看出，当带间的进动项以及带间的电声散射都排除的时候， $n_e(t)$  保持不变（链线）。但是，一旦带间进动项被包含进来，电子可以非常有效地从低能带转移到高能带（点线）。这个过程是，电子在电场下从价带进动到导带，然后被电场拽到更高的能态。电子在带间的转移也可以在声子的辅助下实现（短划线）。在 Dirac 点附近（ $k < k_0 \equiv \omega_0/v_f \approx 0.022 \text{ nm}^{-1}$ ），当导带电子被电场驱动到高能态后，价带的电子倾向于通过吸收声子进入导带。但是，当上面这两个效应同时存在时，它们的效果并不一定造成电子转移的加强。这是因为，带间的进动倾向于在两个带中造成等量的电子分布，而带间的电声倾向于使两个带达成热化的费米分布。当带间进动和电场的驱动在两个带间能有效地转移电子，也即在两个带间造成明显的非平衡（就像这里的情况）时，

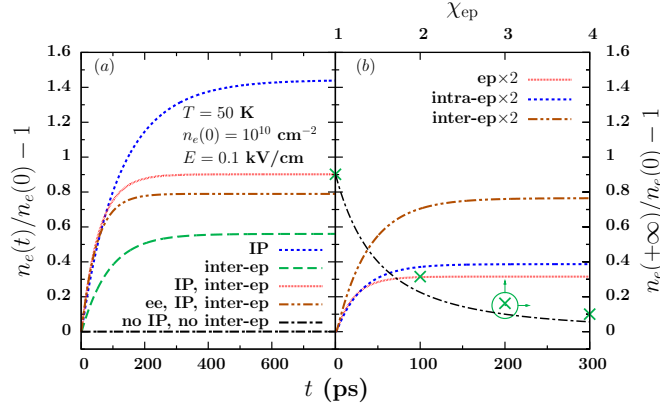


图 9-1:  $E = 0.1 \text{ kV/cm}$ ,  $T = 50 \text{ K}$  以及  $n_e(0) = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  下,  $n_e(t)/n_e(0) - 1$  随时间的演化。在计算中, 电子杂质散射没有被包含, 而带内电声散射 (标记为 intra-ep) 一直存在。(a): 链线是在没有带间进动 (标记为 IP) 以及带间电声散射 (标记为 inter-ep) 时的计算, 短划链 (点线) 只包含了带间电声散射 (带间进动), 而实线同时包含了带间的进动和带间的电声散射。双点链线是在包含了带间的进动、带间的电声散射以及库仑散射 (标记为 ee) 后的计算结果。(b): 在电声散射人为加强后,  $n_e(t)/n_e(0) - 1$  随时间的依赖。带间的进动一直存在。实线是在带内和带间电声散射被乘以因子  $\chi_{ep} = 2$  后计算得到的结果, 而点线 (双点链线) 是只将带内 (带间) 电声散射乘以因子  $\chi_{ep} = 2$  后计算得到的结果。叉点 (刻度在图的上边和右边) 是在稳态下得到的  $n_e$  的相对变化,  $n_e(+\infty)/n_e(0) - 1$ , 对于从 1 增到 4 的调节因子的依赖曲线。链线 (刻度在图的上边和右边) 是函数  $[n_e(+\infty)/n_e(0) - 1]|_{\chi_{ep}=1/\chi_{ep}^2}$ 。

导带的电子倾向于放出声子回到价带。因而, 和只有带间进动的情形 (点线) 比起来, 带间散射和带间进动都存在时 (实线) 的导带电子的稳态浓度反而下降。

正如上面所指出的, 带间进动和带间散射打开了电子在两个带间转移的通道。但是, 这个两带系统的稳态由电子系统从电场获得能量的速率和向声子库释放能量的速率之间的平衡决定。前者由  $\partial_t \varepsilon_i(t) = E \tilde{j}_x(t) \propto E \tilde{S}_y(t)$  决定 [参考方程 (9.11)]。当稳态偏离平衡不远时, 在只有电声散射的情况下我们近似有  $\partial_t \varepsilon_i(+\infty) \propto E^2 |g_0|^{-2}$ 。电子系统能量弛豫的主要通道是带内的电声散射。这是因为带间的电声散射被限制在小的动量范围  $k < k_0$  之内。而且, 在这个小的动量上, 电声散射非常弱, 因为散射率  $\propto k$ 。一个粗糙的估计给出对于低温低浓度的简并情形, 带内电声散射导致的能量弛豫率为  $\partial_t \varepsilon_o(t) \propto |g_0|^2 [n_e(t) - n_e(0)]$ 。因而在近平衡的稳态, 由于  $\partial_t \varepsilon_i(+\infty) = \partial_t \varepsilon_o(+\infty)$  的要求, 我们有

$$n_e(+\infty) - n_e(0) \propto E^2 |g_0|^{-4}, \quad (9.25)$$

基于方程 (9.25), 可以发现, 电声散射、尤其是带内的电声散射的增强, 会导致  $n_e(+\infty)/n_e(0) - 1$  的下降。在图 9-1(b) 中, 我们通过进行和 (a) 中类似的、但是电声散射人为加强了的计算从数值上验证了这一点。实线表明, 当总的电声散射被乘以一个因子  $\chi_{ep} = 2$  加强后, 和真实的情况 [图 (a) 中的实线] 比起

来,  $n_e(+\infty)/n_e(0) - 1$  会明显的下降。当只有带内 (点线) 或者带间 (双点链线) 的电声散射被加强时,  $n_e(+\infty)/n_e(0) - 1$  也会下降。但是, 当只有带间的电声散射加强时 (双点链线), 这个下降并不明显。这表明, 由带间电声散射贡献的能量弛豫确实相对较弱。我们进一步用叉点 (刻度在图的右边和上边) 给出了稳态值  $n_e(+\infty)/n_e(0) - 1$  对从 1 增大到 4 的调节因子  $\chi_{ep}$  的依赖。可以看见, 近似的,  $n_e(+\infty)/n_e(0) - 1 \propto \chi_{ep}^{-2}$ , 满足方程 (9.25) [作为参考, 我们在 (b) 中用链线画出了正比于  $\chi_{ep}^{-2}$  的函数  $[n_e(+\infty)/n_e(0) - 1]|_{\chi_{ep}=1}/\chi_{ep}^2$ ]。

最后我们简要讨论电子-杂质和电子-电子库仑散射对于电子在带间重新布居的影响。尽管这两种散射都不直接导致系统能量的弛豫, 但是他们都会通过限制电流来限制电场的能量注入效率。杂质对电流的影响是显而易见的, 正如这里的方程 (9.23) 和 (9.11) 所表明的。库仑散射通常被认为是保持电流守恒的。在具有抛物能谱的半导体中确实如此, 那里在库仑散射的过程中, 动量和流都是守恒的。但是这里在线性能谱下, 在库仑散射的过程中只有动量是守恒的而流不是守恒的。这个特殊的性质在具有线性能谱的石墨烯中也同样存在 [600]。事实上, 库仑散射的作用可以从我们的解析研究中推断出来。解析解表明  $\tilde{j}_x \propto \tilde{S}_y \propto \tau_k$  [方程 (9.11) 和 (9.22)]。在增加了库仑散射后, 动量散射时间  $\tau_k$  减小, 从而使得电流减小。最终, 在包含了电子-杂质和电子-电子库仑散射后, 电流以及电场的能量注入速率倾向于降低, 使得电子的重新布居效应倾向于变弱。然而, 由于大的相对静态介电常数, 电子-杂质以及电子-电子库仑散射的效应被期望为很弱, 它们的效应只有在温度很低电声散射弱的情况下才可能体现出来。在图 9-1(a) 中, 我们用双点链线代表包含了库仑散射后的结果。在这里所考虑的没有杂质的低温情况下, 库仑散射的贡献可见。和没有库仑散射的情况 (实线) 比起来,  $n_e$  的相对变化下降。

## 9.4.2 电荷和自旋的输运

接下来, 我们分别系统的在低电场区和高电场区研究电荷和自旋的输运。

### 9.4.2.1 低电场区

我们首先关注  $E \leq 0.1$  kV/cm 的低电场区, 并将数值解和前面 9.3 章节中的解析解做比较。我们考虑三种情形, (I)  $T = 50$  K 以及  $n_e(0) = 10^{10}$  cm $^{-2}$  的  $n$  型情况, (II)  $T = 300$  K 以及  $n_e(0) = 5 \times 10^{11}$  cm $^{-2}$  的  $n$  型情况, 以及 (III)  $T = 300$  K 和  $\mu = 0$  的本征情况 [ $n_e(0) \approx 0.8 \times 10^{11}$  cm $^{-2}$ ]。对应于这三种情况, 在图 9-2(a)-(c) 中, 我们在不同杂质浓度下画出了  $n_e(+\infty)/n_e(0) - 1$  对电场的依赖 (注意三个图中  $y$ -轴的刻度比例不一样)。对于 50 K 的低温情形 (I), 由于导带中小的初始电子浓度  $n_e(0)$  以及弱的电声散射,  $n_e$  随着电场的增大明显增加。在小的杂质浓度下,  $n_e$  随着  $E$  的变化速率也增大。此外, 在  $E$  很小时 ( $E < 0.05$  kV/cm),  $n_e(+\infty)/n_e(0) - 1$  对  $E$  近似有平方依赖, 和方程 (9.25) 体现的性质一致。对于情形 (II), 系统高度简并, 在我们研究

的电场范围内电子浓度几乎保持不变（相对变化在  $10^{-3}$  的量级）。然而，对于本征情形 (III)，和情形 (II) 比起来，由于导带电子的占据变少，电子的转移变得相对容易一些。最后，图 9-2(b) 和 (c) 表明，在 300 K 下，杂质的效应可以忽略。

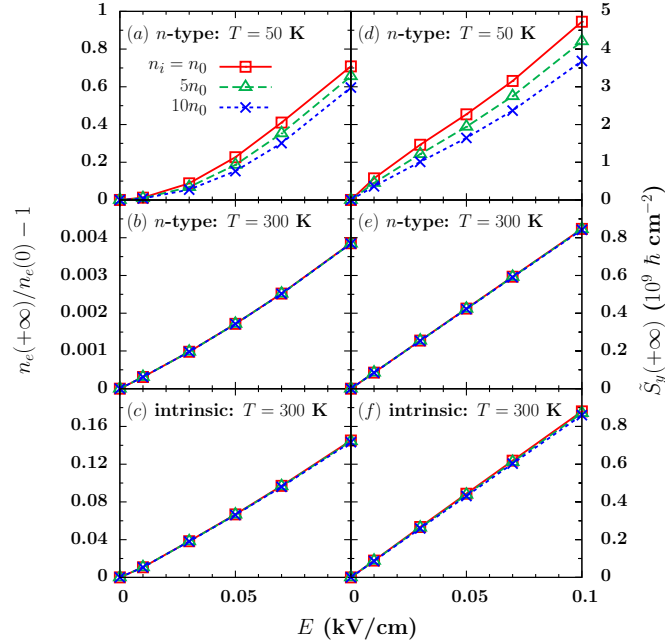


图 9-2: (a)-(c): 对应情形 (I)-(III)，不同杂质浓度下导带电子浓度的相对变化， $n_e(+\infty)/n_e(0) - 1$ ，对电场的依赖关系。 $n_0 = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 。(d)-(f): 对应情形 (I)-(III)，不同杂质浓度下自旋极化  $\tilde{S}_y(+\infty)$  随着电场  $E$  的依赖关系（刻度在图的右边）。

在图 9-2(d)-(f) 中，对情形 (I)-(III)，我们分别给出了稳态下的自旋极化  $\tilde{S}_y(+\infty)$  对电场  $E$  的依赖。该图表明，50 和 300 K 的情形比较起来，由于电声散射弱， $\tilde{S}_y(+\infty)$  随着电场  $E$  的增加更快。对于  $T = 50 \text{ K}$  的情形 (I)，电子杂质散射比较重要，而且  $n_e$  随着  $E$  的增大而有效地增加 [参考图 9-2(a)]，因而  $\tilde{S}_y(+\infty)$  对  $E$  的增长显示出杂质浓度的依赖以及微弱的电场依赖 [参考方程 (9.23)]。但是，对于 300 K 下有强的电声散射的情形 (II) 和 (III)， $\tilde{S}_y(+\infty)$  随着  $E$  线性增大，而且在不同的杂质和电子浓度下显现出几乎一样的速率。这和前面的解析研究是一致的：当电声散射主导时，自旋极化随着电场的增大线性增加，其增长速率仅仅由温度决定 [参考方程 (9.23) 以及那里的讨论]。

接下来，我们在低电场比如  $E = 0.01 \text{ kV/cm}$  下，将数值计算得到的稳态自旋极化和解析解进行比较。在这个电场下，(I)-(III) 三种情形都处在近平衡区域。在图 9-3 中，在所有散射都包含的情况下，我们用三角点表示这三种情况下数值解得的稳态自旋极化对杂质浓度的依赖。同时我们也用叉点表示没有库仑散射时候的结果。可以看见，只有在杂质浓度趋向于零而且温度很低的情况下，库仑散射的效应才显现出来。作为比较，基于方程 (9.23) 的解析计算也在图中用实线画出。可以发现，解析公式能够体现数值解的绝大部分行为。我们还发现，在电声散射作弹性近似更具有合理

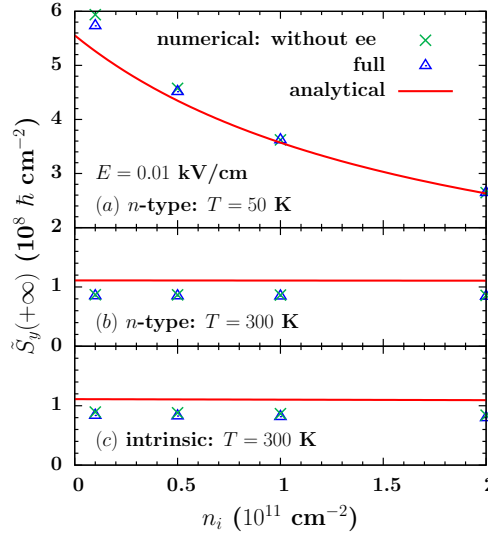


图 9-3: (a)-(c): 对应于情形 (I)-(III), 稳态下电场导致的自旋极化  $\tilde{S}_y(+\infty)$  随杂质浓度的依赖。三角点由数值求解完整的动力学自旋 Bloch 方程得到, 而又点是在没有电子-电子库仑散射 (标记为 “ee”) 情形下计算得到的结果。实线来自解析公式 (9.23) 给出的结果。

性的 300 K 下 ( $k_B T \gg \hbar \omega_0$ ), 用方程 (9.23) 对数值解的最好拟合给出  $\alpha_1 = 17$ 。最后, 图 9-3(b) 和 (c) 更清楚的表明, 在室温下, 即使杂质浓度  $n_i$  达到  $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , 电子-杂质散射仍旧可以忽略。事实上, 根据前面的解析解, 我们对于所考虑的三种情形可以估算出动量散射时间: (I)  $\tau_{k_f}^{\text{ei}} = 4.5 \text{ ps}$  和  $\tau_{k_f}^{\text{ep}} = 2.5 \text{ ps}$ , (II)  $\tau_{k_f}^{\text{ei}} = 31.8 \text{ ps}$  和  $\tau_{k_f}^{\text{ep}} = 0.07 \text{ ps}$ , (III)  $\langle \tau_k^{\text{ei}} \rangle = 19.7 \text{ ps}$  和  $\langle \tau_k^{\text{ep}} \rangle = 0.17 \text{ ps}$ 。在我们的估算中, 杂质浓度取为  $n_i = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。这些值定量的表明了高温下电声散射的重要性。

#### 9.4.2.2 高电场区

在研究了低电场区并且和解析解做比较后, 我们进一步研究高电场区 ( $E$  可达  $7 \text{ kV/cm}$ )。150 和 300 K 下的本征非简并以及  $n$  型简并情况都被考虑。对于简并情形, 我们取  $n_e(0) = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。杂质浓度固定在  $n_i = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。在我们所研究的温度范围内, 这个杂质浓度对应的电子-杂质散射事实上可以忽略。

我们首先在不同的温度下, 展示本征和  $n$  型情形下稳态导带电子浓度  $n_e(+\infty)$  对电场的依赖。图 9-4 左图表明对于两种情形, 除了在 Pauli 阻塞效应很重要的简并情形的低电场区 ( $E < 2 \text{ kV/cm}$ ),  $n_e(+\infty)$  随着电场  $E$  几乎线性增大。其实, 在本征的石墨烯中, 当  $E > 0.01 \text{ kV/cm}$  时, 导带电子浓度随着电场几乎线性增大的现象也被指出过 [594]。在这里, 我们还注意到, 在近线性区,  $n_e(+\infty)$  随着  $E$  的增大速率由温度决定, 而对电子浓度不敏感。这种线性关系以及温度依赖的增长速率是与具有近乎常数的散射矩阵元的电声散射占主导这一事实紧密联系的。作为对比, 我们在 300 K 的本征情形下, 人为设定电声散射矩阵元 [方程 (9.8)] 中的系数  $\lambda_1 = 0$  以及  $\lambda_2 = 20 \text{ eV} \cdot \text{nm}^2$ ,



然后重新做数值计算。结果用图中的圆点表示。可以看见，它非常明显的偏离线性关系。最后，对于 150 K 的本征情形，我们做了没有库仑散射的计算，并将结果用实心方框表示。实心 and 空心方框的对比表明，库仑散射的效应在电场低的时候可以忽略，在电场高的时候变得相对重要一些。

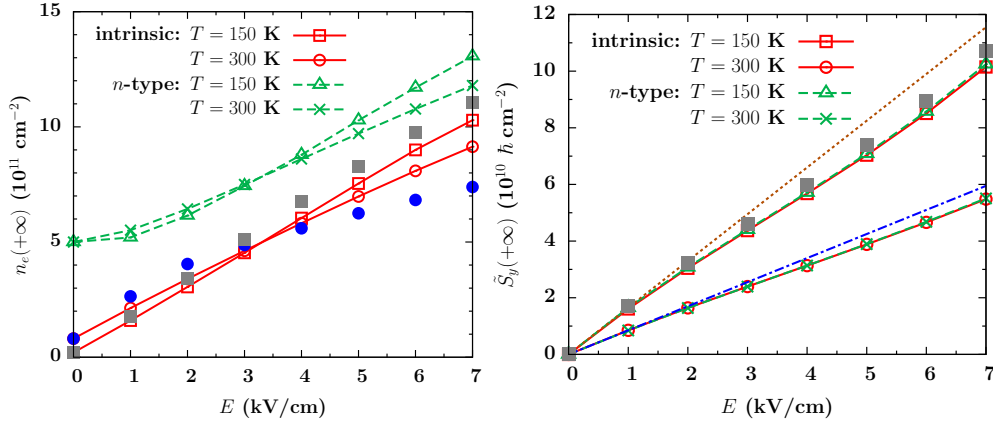


图 9-4: 左图: 不同温度下, 对于本征的非简并情形 (实线) 和  $n$  型的简并情形 (短划线), 稳态下导带电子浓度  $n_e(+\infty)$  随着电场的依赖关系。图中的点来自 300 K 下对于本征情形的计算, 不过在电声散射矩阵元中 [方程 (9.8)] 我们人为设置  $\lambda_1 = 0$  以及  $\lambda_2 = 20 \text{ eV}\cdot\text{nm}^2$ 。实心方框来自 150 K 下对于本征情形没有库仑散射的计算。右图: 不同温度下, 对于本征的非简并情形 (实线) 和  $n$  型的简并情形 (短划线) 稳态自旋极化对电场的依赖。点线和链线由方程 (9.23) 分别在 150 K 和 300 K 给出, 计算中我们取  $\alpha_1 = 17$ 。实心方框来自 150 K 下对于本征情形没有库仑散射的计算。

我们接着考察电场导致的稳态自旋极化  $\tilde{S}_y(+\infty)$ 。在图 9-4 右图中, 我们给出了不同温度下本征和  $n$  型情形下稳态自旋极化对电场的依赖。非常有趣的是, 在整个电场范围内, 电声散射占主导,  $\tilde{S}_y(+\infty)$  由温度决定, 就像上面在低电场区表明的那样。此外, 在相同的电场下,  $\tilde{S}_y(+\infty)$  在 150 K 下的值是 300 K 下的值的两倍, 近似满足高温下的解析关系  $\tilde{S}_y(+\infty) \propto T^{-1}$ 。在图中, 我们同时也画出方程 (9.23) 在修正的  $\alpha_1 = 17$  下给出的  $\tilde{S}_y(+\infty)$ - $E$  关系 (点线对应 150 K 情形, 链线对应 300 K 情形)。可以发现,  $\tilde{S}_y(+\infty)$  的解析公式在 150 K (300 K) 时, 在  $E_c = 2 \text{ kV/cm}$  ( $E_c = 4 \text{ kV/cm}$ ) 以下, 可以很好地应用。当  $E$  超过  $E_c$  时, 电子的热化变得重要, 伴随着大动量态的占据, 电声散射得到加强。同时, 电声散射矩阵元的动量依赖 [来自方程 (9.8) 中  $\lambda_2 q$  的项] 也会起作用, 进一步增强电声散射。结果,  $\tilde{S}_y(+\infty)$  倾向于减小并偏离对  $E$  的线性依赖。最后, 对于 150 K 的本征情形, 我们也给出了没有库仑散射的结果 (实心方框)。我们再一次看见, 库仑散射对于自旋极化的影响非常弱, 尤其是在低电场区。

我们现在研究这个两能带系统的迁移率。根据方程 (9.11), 电场下稳态的电流为  $\tilde{j}_x(+\infty) = 2ev_f\tilde{S}_y(+\infty)/\hbar$ 。因此, 稳态下的电子-空穴系统的迁移率为  $\mu_c = \tilde{j}_x(+\infty)/[eE(n_e(+\infty)+n_h(+\infty))]$ 。在图 9-5 中, 我们在不同的温度下画出了本征和  $n$  型

情形下  $\mu_c$  随  $E$  的变化曲线。 $\mu_c$  在  $10^3 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$  的量级，和实验测得的数据一致 [155, 158, 593]。 $\mu_c$  随着电场  $E$  的增大而下降，因为电子和空穴被热化到占据大的动量态从而使得电声散射增强。同时，随着温度从 150 增到 300 K， $\mu_c$  也跟着下降。事实上，我们近似有  $\mu_c \approx (\mu_c^{0-1} + \gamma E)^{-1}$ ，因为  $n_e(+\infty) + n_h(+\infty)$  和  $\tilde{j}_x(+\infty)$  对  $E$  都近似线性依赖。这里  $\gamma$  由  $n_e(+\infty)$  和  $\tilde{j}_x(+\infty)$  随着  $E$  的增长速率决定，而在大的电场下它们都只对温度敏感（如图 9-4 所表明的那样）。因此在大的电场区， $\mu_c \approx \gamma^{-1} E^{-1}$ ， $\gamma$  由温度决定。这个性质在图 9-5 中  $E \gtrsim 3 \text{ kV/cm}$  的区域表现出来。

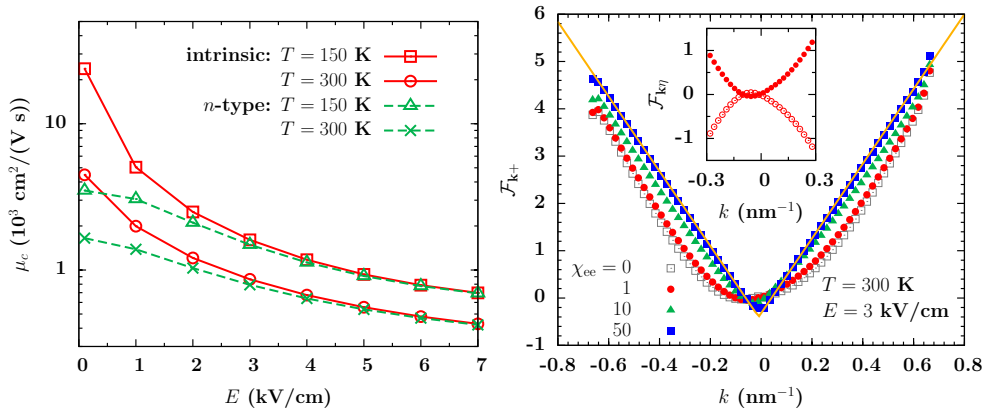


图 9-5: 左图: 不同温度下, 本征情形 (实线) 和  $n$  型情形 (短划线) 迁移率对电场的依赖。右图: 稳态下函数  $\mathcal{F}_{\mathbf{k}+} \equiv \ln(1/f_{\mathbf{k}+} - 1)$  在动量空间沿着  $x$  方向的分布, 数据来自  $T = 300 \text{ K}$  时本征情形在  $E = 3 \text{ kV/cm}$  电场下的演化。圆点来自对真实情况的计算, 而空心方框、三角、实心方框分别来自于库仑散射项乘以  $\chi_{ee} = 0, 10$  以及  $50$  后的计算。实线是对实心方框的拟合, 所用的热电子温度为  $T_e \approx 488 \text{ K}$ 。插图: 稳态下函数  $\mathcal{F}_{\mathbf{k}\eta} \equiv \ln(1/f_{\mathbf{k}\eta} - 1)$  [实心 (空心) 圆点对应导带 (价带) 的电子, 标记为  $\eta = +(-)$ ] 在小的动量范围内沿着  $x$  方向的分布。

### 9.4.3 库仑散射的效应

我们简要研究库仑散射对电场下平衡态建立的影响。在上一节中, 我们已经看见, 由于大的相对静态介电常数, 在电声散射和电子杂质散射存在的情况下, 库仑散射的影响非常微弱。在这个弱的库仑散射下, 两带的电子不能够达到具有统一热电子温度的漂移费米分布。为了揭示这一点, 我们以  $T = 300 \text{ K}$  和  $E = 3 \text{ kV/cm}$  下的本征情形为例, 在图 9-5 右图中画出了人为调节的不同的库仑散射强度下 [246], 函数  $\mathcal{F}_{\mathbf{k}+} \equiv \ln(1/f_{\mathbf{k}+} - 1)$  沿着  $x$  方向对动量  $k$  的依赖。这些数据间的比较表明, 只有当库仑散射足够强的时候 (比如, 库仑散射项被人为乘上因子  $\chi_{ee} = 50$ ), 在稳态下电子达到漂移的费米分布  $f_{\mathbf{k}\pm} = 1/\{\exp[(\hbar v_f |\mathbf{k} - \mathbf{k}_x^0| - \mu_{\pm})/(k_B T_e)] + 1\}$ 。这里  $T_e$  是统一的热电子温度,  $\mathbf{k}_x^0$  是受散射限制的漂移动量。它们可以分别从图中的“V”字型的翼的斜率和谷底的位置得到 (实线做为参考)。 $\mu_{\pm}$  是两个带的化学势。对于这里给出的本征情形, 由于两个带间的对称性,  $\mu_+ = -\mu_-$ 。在这个图的插图中, 我们在小动量范围内给

出了真实 ( $\chi_{ee} = 1$ ) 的本征情形下  $\mathcal{F}_{\mathbf{k}+}$  (实心点) 和  $\mathcal{F}_{\mathbf{k}-}$  (空心点) 随动量的依赖。虽然漂移的费米分布并没有达到, 但是导带和价带的对称性在插图中很清楚地表现了出来。

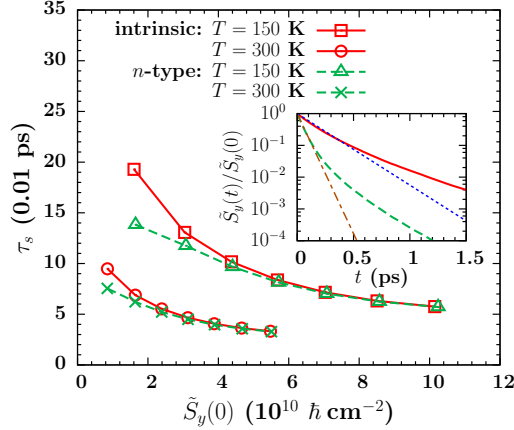


图 9-6: 不同温度下自旋弛豫时间  $\tau_s$  随初始自旋极化  $\tilde{S}_y(0)$  的依赖。实线 (短划线) 对应本征 ( $n$  型) 情况。在插图中, 我们给出了两种情形下  $\tilde{S}_y(t)/\tilde{S}_y(0)$  随时间的演化。这两种情况中,  $\tilde{S}_y(0)$  分别在 1 (实线) 和 7 kV/cm (短划线) 的电场下初始化。点线 (链线) 分别是对实线 (短划线) 初始阶段快的衰减部分的指数拟合。

#### 9.4.4 自旋弛豫

最后, 我们从电场下达到的稳态的自旋极化出发, 研究关掉电场后的自旋弛豫。时间的零点,  $t = 0$ , 被重置到电场关掉的那一刻。从  $t = 0$  时刻开始, 伴随着能量的弛豫, 热化的电子渐渐冷却到初始的费米分布。由于弱的带间散射的限制, 这个时间尺度在 100-1000 ps 的量级。但是, 自旋极化在动量散射的时间尺度内就很快弛豫掉了 [588, 590]。根据方程 (9.24), 在弱散射极限  $v_f k \tau_k \gg 1$  下,  $\tilde{S}_{k_y}(t)$  近似以指数形式衰减。而总的自旋极化,  $\tilde{S}_y(t)$ , 包含对  $\tilde{S}_{k_y}(t)$  在动量空间的求和, 并不一定以好的指数形式衰减。我们的计算表明,  $\tilde{S}_y(t)$  随着时间  $t$  首先很快的衰减到  $0.1\tilde{S}_y(0)$  左右, 然后缓慢的弛豫。幅度很小、但是弛豫很慢的这个尾巴由 Dirac 点附近动量弛豫时间很长的低能态贡献。作为例子, 我们在图 9-6 的插图中画出了 150 K 本征情形下  $\tilde{S}_y(t)/\tilde{S}_y(0)$  对  $t$  的依赖。实线和破折线的初态分别在 1 和 7 kV/cm 的电场下演化得到。为了得到自旋弛豫时间  $\tau_s$ , 我们利用指数函数拟合时间依赖曲线中刚开始的快速衰减过程。插图中的点线和链线展示了我们的拟合。

在图 9-6 中, 我们对本征和  $n$  型情形, 给出了不同温度下自旋弛豫时间  $\tau_s$  对初始自旋极化  $\tilde{S}_y(0)$  的依赖。可以看见, 自旋弛豫时间在 0.01-0.1 ps 的量级, 主要由电子-声子散射决定。Butch 等人从估算和实验上给出了具有相似尺度的动量散射时间。随着  $\tilde{S}_y(0)$  的增大,  $\tau_s$  减小。这是由于大的  $\tilde{S}_y(0)$  是由较高的电场初始化得到的, 因而电

子和空穴占据高的动量态，从而具有快的动量弛豫。此外，在高温下，由于电声散射的增强，自旋弛豫时间也下降。

## 9.5 小结

在这一章中，我们研究了高达几个  $\text{kV/cm}$  的电场下，拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的表面态电子的电荷和自旋的输运性质。在适中的电子和空穴浓度下，Dirac 点附近的表面态可以用 Rashba 自旋轨道耦合描述。在我们的研究中，表面态的导带和价带都被考虑，带间的关联也被明确的包含进来。电场除了驱动各个带内的电子，由于导带价带自旋的混合，它还会在两个带间造成进动。在  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  中，相对静态介电常数可以大到 100，这意味着弱的电子杂质和电子-电子库仑散射。由于弱的库仑散射，在电场驱动下，两个带中的电子不能达到具有统一热电子温度的漂移费米分布。在很大的温度范围内，电子-表面光学声子散射占主导。而且，电子-表面光学声子散射矩阵元对动量的依赖很弱，近似为常数。这些特征导致  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  表面电荷和自旋输运的特别性质。

我们的研究表明，在电场的作用下，带间的进动和带间的散射都会导致电子从价带到导带的转移。由于电声散射占主导，在高电场下，各个带的电子浓度随着电场线性变化，不管初态是简并的还是非简并的。我们还发现，由于 Rashba 自旋轨道耦合导致的自旋-动量锁定，电场会诱导横向的自旋极化，其大小正比于动量散射时间。此外，在小电场下，自旋极化和电场强度成正比，但是当后者足够大的时候两者的关系偏离线性性质。另外一个非常有意思的现象是，在高温下，自旋极化和温度成反比，但是对电子浓度不敏感。在系统达到稳态后，我们撤掉电场，研究热电子的冷却和电场导致的自旋极化的弛豫。结果表明，热化的载流子在 100-1000 ps 的时间尺度内回到加电场前的平衡态。这个时间对应系统的能量弛豫时间。但是，由于自旋-动量的锁定，自旋极化在动量散射的时间尺度内弛豫，只有 0.01-0.1 ps 的量级。

## 第十章 多铁氧化物界面处二维电子系统的自旋输运

### 10.1 研究背景

在前面的章节中，我们依次研究了半导体量子阱、石墨烯以及拓扑绝缘体表面态中二维电子系统的自旋弛豫和输运性质。在本论文的最后一章，我们考察沿着斜方晶系多铁氧化物  $\text{TbMnO}_3$  的  $\hat{c}$  轴生长的三层结构  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3/\text{TbMnO}_3$  [426, 427, 601, 602] 中  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处的二维电子系统的自旋输运性质。

在章节 2.4 中我们已经指出作为多铁材料， $\text{TbMnO}_3$  能够同时具有磁有序和电有序 [423, 437, 603]。在这里我们只考虑低温下它的磁有序结构对  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处二维电子系统自旋输运性质的影响。当中间层  $\text{SrTiO}_3$  很薄（有限的几个原子层）时，界面处的二维电子气与  $\text{SrTiO}_3/\text{TbMnO}_3$  界面附近  $\text{TbMnO}_3$  中的螺旋磁矩通过 Heisenberg 交换相互作用耦合。我们假设通过门电压调节可以抵消掉多铁材料的电极化以及界面电势对二维电子系统的影响。因而在该二维电子系统中，Rashba 自旋轨道耦合没有考虑。

这种与多铁材料结合在一起的氧化物结构以及界面处二维电子系统的自旋输运性质的研究由 Jia 和 Berakdar 提出 [426, 427]。他们声称，当沿着  $\text{TbMnO}_3$  中磁矩的螺旋平面注入自旋（沿着  $\hat{b}$  方向）并使自旋的极化方向与该平面垂直（沿着  $-\hat{a}$  方向）时，自旋在扩散的过程中没有弛豫，因而自旋注入长度是无穷长的 [426]。基于此，他们还提出了“自旋闪存”的模型 [427]。但是，事实上并非如此。我们的研究表明，正是由于  $\text{TbMnO}_3$  中的螺旋磁矩与扩散的自旋的 Heisenberg 交换相互作用，使得不论注入的自旋的极化方向如何，自旋的扩散长度都是有限的。我们的研究还表明了库仑散射的重要性，它能够有效地压制自旋扩散。

### 10.2 模型

我们假设  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处的二维电子气被一个阱宽为 3 nm 的无限深势阱所约束。电子的有效质量取为  $m^* = 10m_e$ 。电子的浓度取为  $N_e = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 。我们设定坐标系为  $\hat{x} = \hat{b}$ ， $\hat{y} = -\hat{a}$  以及  $\hat{z} = \hat{c}$ 。温度取为 15 K，低于  $\text{TbMnO}_3$  的铁电居里温度  $T_c \sim 27 \text{ K}$ 。在  $T_c$  以下， $\text{TbMnO}_3$  中的  $\text{Mn}^{3+}$  提供的磁矩在  $x$ - $z$  平面形成螺旋态。这些局域的磁矩可近似描述为  $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = M \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})\hat{x} + M \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})\hat{z}$ ，其中  $\mathbf{q} = (0.27 \times \frac{2\pi}{b}, 0, \frac{2\pi}{c})$  是调制波矢 [422–427]。这里  $\text{TbMnO}_3$  的晶格常数  $b =$

0.586 nm 和  $c = 0.749$  nm [423]。更进一步，我们假设 LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> 界面处的二维电子气只与 TbMnO<sub>3</sub> 中靠近 SrTiO<sub>3</sub> 的表面处（也即  $z = 0$  平面）的有效磁矩发生 Heisenberg 交换相互作用 [426, 427]。最终，在 collinear 自旋空间，该二维电子气的单粒子哈密顿量为 [426, 427]

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*} + J\hat{\mathbf{n}}_{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (10.1)$$

其中等号右边的第一项代表动能，第二项代表电子与局域磁矩的交换相互作用。单位矢量  $\hat{\mathbf{n}}_{\mathbf{r}} = (\sin(q_x x), 0, \cos(q_x x))$  代表  $z = 0$  平面上局域磁矩的方向。 $J$  描述交换相互作用的强度，其大小可以通过改变中间层 SrTiO<sub>3</sub> 的厚度或者用门电压调节二维电子气与 TbMnO<sub>3</sub> 的距离来调控。在我们的计算中，我们假定  $J$  可以在 0 到与电子气费米能（大约在 2.4 meV）相拟的值之间变化 [426]。

### 10.3 SU(2) 规范变换与有效磁场

我们利用么正矩阵  $U_g(x) = e^{-iq_x x \sigma_y / 2}$  对哈密顿量 (10.1) 施加局域的 SU(2) 规范变换，使得自旋的  $z$  轴从原来的  $\hat{\mathbf{c}}$  方向旋转到局域的磁矩方向  $\hat{\mathbf{n}}_{\mathbf{r}}$ 。在这个自旋的螺旋空间中，哈密顿量变为

$$\tilde{H} = \frac{1}{2m^*} \left[ \left( P_x - \frac{\hbar q_x \sigma_y}{2} \right)^2 + P_y^2 \right] + J\sigma_z. \quad (10.2)$$

写到动量空间，并且忽略常数项，我们有

$$\tilde{H} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} + \mathbf{h}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (10.3)$$

其中

$$\mathbf{h}_{\mathbf{k}} = \left( 0, \frac{\hbar^2 q_x}{2m^*} k_x, J \right). \quad (10.4)$$

从上述表达式可以看出，在旋转后的自旋空间，电子的自旋感受到的有效磁场来自于两个方面的贡献。一个是由空间螺旋结构引入的动量依赖的规范场， $h_{ky} = \frac{\hbar^2 q_x}{2m^*} k_x$ ，另一个是由 Heisenberg 交换相互作用提供的有效静磁场， $h_{kz} = J$ 。

联系旋转前后空间里的自旋极化矢量的旋转矩阵  $R(x)$  满足关系  $U_g^\dagger(x) \boldsymbol{\sigma} U_g(x) = R(x) \boldsymbol{\sigma}$ ，因而我们有

$$R(x) = \begin{pmatrix} \cos(q_x x) & 0 & \sin(q_x x) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(q_x x) & 0 & \cos(q_x x) \end{pmatrix}. \quad (10.5)$$

在自旋的螺旋空间里我们通过求解动力学自旋 Bloch 方程得到位置依赖的自旋极化矢量后，就可以借助矩阵  $R^T(x)$  得到旋转前空间里位置依赖的自旋极化矢量，从而研究自旋的输运性质。我们注意到由于这个规范变换是自旋空间里绕着  $y$  轴的旋转，因此自旋的  $y$ -分量在两个空间里是保持不变的。

## 10.4 螺旋空间里的自旋弛豫

在研究实空间的自旋输运性质之前，我们先从电子感受到的有效磁场  $\mathbf{h}_{\mathbf{k}}$  [方程 (10.4)] 出发考察在旋转后的螺旋空间里的自旋弛豫。注意到在  $J = 0$  时，方程 (10.4) 和 (001) GaAs 量子阱中具有同等强度的 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合（均只考虑到动量的线性阶）提供的有效磁场形式一样。对于后者，在设定  $x$  轴沿着  $[1\bar{1}0]$  方向和  $y$  轴沿着  $[110]$  方向时自旋轨道耦合提供的有效磁场为  $\tilde{\mathbf{h}}_{\mathbf{k}} = (0, 2\gamma k_x, 0)$ ，其中  $\gamma$  是 Rashba（或者 Dresselhaus）自旋轨道耦合的强度 [496, 500, 501, 570, 604]。因而，当自旋极化沿着  $y$  轴时，它不会进动，从而导致无穷长的自旋弛豫时间 [496, 500, 501, 570, 604]。Jia 和 Berakdar 的论断，即在  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3/\text{TbMnO}_3$  结构中  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处的二维电子气的自旋不会弛豫，正是基于此。但是，需要注意的是，在这里，电子和螺旋磁矩的 Heisenberg 交换相互作用提供了一个沿  $z$ -方向的有效静磁场，它能将自旋极化旋转偏离  $y$  轴从而使其感受到由  $y$ -方向有效磁场提供的非均匀扩展。在任何散射的存在下，不可逆的自旋弛豫得以发生。实际上，在有效磁场  $\mathbf{h}_{\mathbf{k}}$  [方程 (10.4)] 下，沿着任何方向的自旋极化都会感受到非均匀扩展并发生弛豫。这种情形类似于对称的 (110) GaAs 量子阱中的状况 [502, 503]。在那里，如果只考虑最低子带，由 Dresselhaus 自旋轨道耦合提供的有效磁场平行于阱的生长方向，从而在该方向上导致无穷长的自旋弛豫时间。但是，一旦在量子阱平面内加上静磁场，自旋弛豫时间将变成有限的 [502, 503]。

我们将定量的将库仑散射包含了进来，在时间域里数值求解了动力学自旋 Bloch 方程。在图 10-1 中，我们展示了自旋极化（初始极化为 5%）的时间演化过程。可以清楚地看到，当初始自旋极化的方向  $\hat{\mathbf{n}}$  沿着  $\hat{\mathbf{y}}$  时，只有当  $J = 0$  时自旋极化才不弛豫。当初始自旋极化方向不沿  $\hat{\mathbf{y}}$  时，即使  $J = 0$ ，自旋极化也会弛豫。

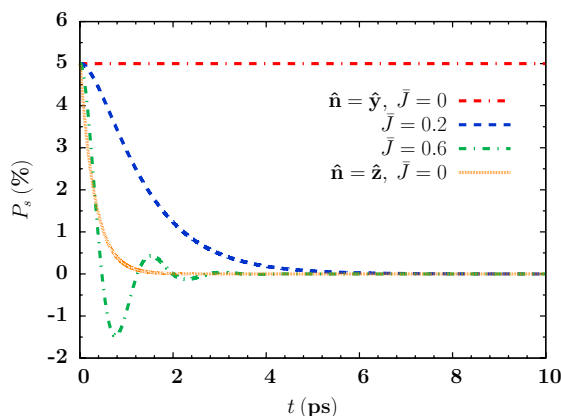


图 10-1: 在不同  $J$  值的情况下，沿不同方向的自旋极化随着时间的演化。图中  $\bar{J} = \frac{m^*}{\pi N_e \hbar^2} J$ 。

## 10.5 自旋的扩散

接下来我们研究 LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> 界面处自旋的扩散。我们先从解析上研究了不考虑散射的简单情形，然后数值地求解了包含库仑散射的动力学自旋 Bloch 方程。

### 10.5.1 无散射时的解析解

当不考虑散射时，螺旋空间的动力学自旋 Bloch 方程具有稳态解

$$\rho_{\mathbf{k}}(x, +\infty) = e^{-i\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} x/2} \rho_{\mathbf{k}}(0, +\infty) e^{i\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} x/2}, \quad (10.6)$$

其中

$$\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} = \frac{2m^*}{\hbar^2 k_x} \mathbf{h}_{\mathbf{k}} = (0, q_x, \frac{2m^*}{\hbar^2 k_x} J) \quad (10.7)$$

描述在空间域的自旋进动频率。可以看见，正是来源于 Heisenberg 交换相互作用的有效静磁场，在空间域的扩散过程中提供了形如  $Jk_x^{-1}$  的非均匀扩展。这个效应在第 5 章中已经指出并研究过。

由稳态密度矩阵 (10.6)，我们可以得到自旋极化在空间的依赖。固定  $x = 0$  处  $k_x > 0$  的密度矩阵作为边界条件，考虑自旋极化的且能沿着  $x$  轴运输的  $k_x > 0$  的电子（在没有散射的情况下沿  $-x$  轴运输的  $k_x < 0$  的电子始终无极化，因而不予考虑） [570]，自旋极化  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(x) \equiv \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(x, +\infty)\boldsymbol{\sigma}] = F_{\mathbf{k}}(x)\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(0)$ ，其中

$$F_{\mathbf{k}}(x) = \begin{pmatrix} \cos(\omega_{\mathbf{k}}x) & -\hat{h}_{\mathbf{k},z} \sin(\omega_{\mathbf{k}}x) & \hat{h}_{\mathbf{k},y} \sin(\omega_{\mathbf{k}}x) \\ \hat{h}_{\mathbf{k},z} \sin(\omega_{\mathbf{k}}x) & \hat{h}_{\mathbf{k},y}^2 + \hat{h}_{\mathbf{k},z}^2 \cos(\omega_{\mathbf{k}}x) & \hat{h}_{\mathbf{k},y} \hat{h}_{\mathbf{k},z} [1 - \cos(\omega_{\mathbf{k}}x)] \\ -\hat{h}_{\mathbf{k},y} \sin(\omega_{\mathbf{k}}x) & \hat{h}_{\mathbf{k},y} \hat{h}_{\mathbf{k},z} [1 - \cos(\omega_{\mathbf{k}}x)] & \hat{h}_{\mathbf{k},z}^2 + \hat{h}_{\mathbf{k},y}^2 \cos(\omega_{\mathbf{k}}x) \end{pmatrix}. \quad (10.8)$$

这里  $\omega_{\mathbf{k}} = |\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}}|$ ， $\hat{h}_{\mathbf{k}y(z)} = h_{\mathbf{k},y(z)}/|\mathbf{h}_{\mathbf{k}}|$  以及  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(0) = \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}(0, 0)\boldsymbol{\sigma}]$ 。因而在螺旋空间总的自旋极化为

$$\mathbf{S}(x) = \sum_{k_x > 0} \mathbf{S}_{\mathbf{k}}(x) = \sum_{k_x > 0} F_{\mathbf{k}}(x)\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(0). \quad (10.9)$$

回到旋转前的 collinear 空间，自旋极化为

$$\mathbf{S}^c(x) = R^T(x)\mathbf{S}(x). \quad (10.10)$$

在无散射的情况下，针对不同的 Heisenberg 耦合强度  $J$  和注入的自旋极化的方向  $\hat{\mathbf{n}}$ ，我们从方程 (10.10) 出发，计算了自旋极化  $\mathbf{S}^c(x)$  在  $\hat{\mathbf{n}}$  方向上的投影， $S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(x) \equiv \mathbf{S}^c(x) \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 。在计算中，我们设定  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(0) = [f(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu_+) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu_-)]\hat{\mathbf{n}}$  [332, 493, 570]。其中  $f(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\xi})$  ( $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2/2m^*$ ) 是温度  $T$  下的费米分布。化学势  $\mu_{\xi}$  由电子浓度  $N_e$  和注入自旋的极化率 (取为 5%) 决定 [332, 493, 570]。在图 10-2 中，我们画出



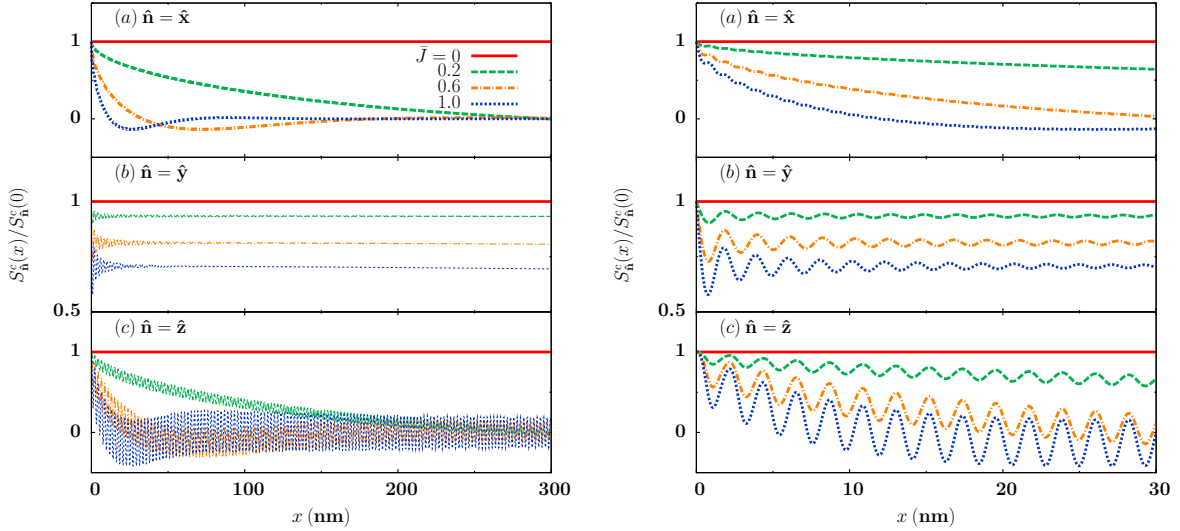


图 10-2: Collinear 自旋空间里，对于不同的自旋极化方向  $\hat{\mathbf{n}}$  和 Heisenberg 耦合强度  $\bar{J}$ ， $S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(x)/S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(0)$  随  $x$  的分布。(a):  $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{x}}$ ; (b):  $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{y}}$ ; (c):  $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{z}}$ 。左图画在大的  $x$  尺度范围，而右图画在小的  $x$  尺度范围。

了  $S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(x)/S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(0)$  对  $x$  的依赖。从图中可以看到，当  $J \neq 0$  时，在扩散的过程中自旋有弛豫。 $J$  越大，自旋随位置弛豫的越快。而且当  $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{y}}$  时， $S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(x)$  弛豫到一个有限的值。但是，稍后我们会看到，当考虑进散射的时候，这种情形下的自旋极化也会完全弛豫到 0。此外，在  $J \neq 0$  时，自旋极化的空间依赖体现出了高频的振荡 [见画在小  $x$  范围内的图 10-2(d)-(f)]。该振荡的频率与螺旋磁矩的旋转频率  $q_x$  可比拟，而且对交换相互作用的强度不敏感。作为对比，我们将  $\text{TbMnO}_3$  中磁矩的螺旋序人为改变成沿  $z$  轴极化的铁磁序，然后重新计算  $S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(x)$ 。在我们的计算中设定  $q_x = 0$  即可实现这一点。对应的结果画在图 10-3 左图中，可以清楚看到高频的振荡消失了。同时，当自旋极化沿着  $z$  轴时，由于没有了非均匀扩展，自旋将不弛豫。

### 10.5.2 包含库仑散射的数值解

上面在无散射情形下输运过程中自旋极化的衰减纯粹来自于干涉效应 [274]。接下来我们考虑进库仑散射，在双边注入的边界条件下 [11, 332, 450, 493]，数值地求解动力学自旋 Bloch 方程。在图 10-3 右图中，对于  $J \neq 0$  的情形，我们画出了  $S_{\hat{\mathbf{n}}}^c$  对  $x$  的依赖。可以看见，库仑散射非常有效地导致了自旋扩散过程中的自旋弛豫。图 10-3 右图和 10-2 的对比表明，在有散射时，沿着各个方向的自旋扩散都被压制 [332]。特别地，当自旋极化方向沿着  $y$  轴时，自旋极化也能够完全衰减到 0。

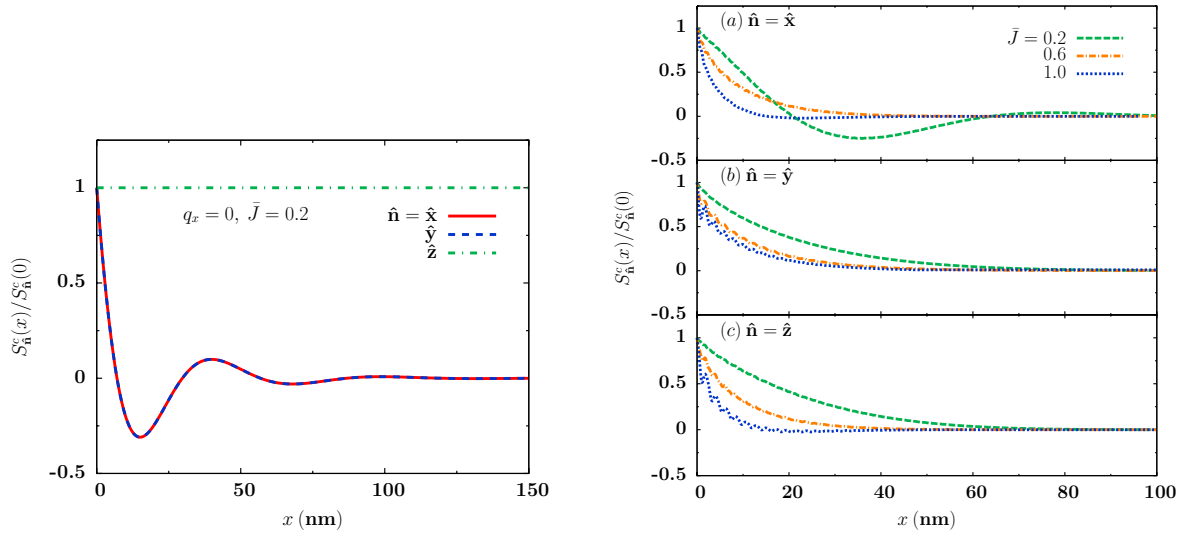


图 10-3: 左图: 设定  $q_x = 0$ , 在不同的自旋极化方向  $\hat{\mathbf{n}}$  时,  $S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(x)/S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(0)$  随着  $x$  的依赖。 $\bar{J} = 0.2$ 。右图: 在不同的  $\hat{\mathbf{n}}$  和  $\bar{J}$  时,  $S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(x)/S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(0)$  对  $x$  的依赖。这里  $S_{\hat{\mathbf{n}}}^c(x)$  是通过数值求解包含库仑散射的动力学自旋 Bloch 方程得到的。

## 10.6 小结

在这一章中, 我们研究了生长在多铁材料  $\text{TbMnO}_3$  上的氧化物  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  的界面处的自旋扩散。在低温下 ( $< 27 \text{ K}$ ),  $\text{TbMnO}_3$  中  $\text{Mn}^{3+}$  的磁矩形成螺旋态并且和  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处的二维电子气通过 Heisenberg 交换相互作用发生耦合。我们的研究发现, 正是由于这个 Heisenberg 交换相互作用, 在自旋扩散的过程中会伴随自旋弛豫的发生。因此, 文献中声称的无穷长的自旋扩散长度 [426, 427] 是不存在的。此外, 我们的研究还表明, 电子-电子库仑散射可以有效地压制自旋扩散。

在我们的研究中, 由于对杂质浓度的过低估计, 在数值计算中仅仅包含了库仑散射。正确的估计表明, 在  $15 \text{ K}$  的实际样品中, 电子-杂质的散射是主导的<sup>①</sup>。可以预计, 在考虑了电子-杂质散射后, 自旋的扩散会被进一步的压制, 如同在第 6 章中揭示的那样。

<sup>①</sup>T. Yu 估计, 在电子浓度为  $10^{13} \text{ cm}^{-2}$  时, 实验测得的典型的  $10^4 \text{ cm}^2/(\text{V s})$  的迁移率对应杂质浓度在  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$  的量级。在这个杂质浓度以及  $15 \text{ K}$  的低温下, 电子-杂质散射是主导的。

## 第十一章 总结

本论文主要研究了二维电子系统中的自旋动力学，包括自旋的弛豫和输运。我们研究的体系涉及到半导体、石墨烯、拓扑绝缘体以及多铁氧化物。

我们首先从金属自旋电子学、半导体自旋电子学和有机自旋电子学三个方面回顾了自旋电子学的发展，然后介绍了实验上常用的自旋极化的产生和探测方法，接着讨论了在时间域里的自旋弛豫机制和空间域输运过程中的自旋弛豫机制。在了解了基础背景后，我们对本论文所要研究的材料和体系，特别对石墨烯的自旋动力学的研究现状，分别做了介绍。之后，我们介绍了本论文研究自旋动力学所采用的方法，即动力学自旋 Bloch 方程方法。在动力学自旋 Bloch 方程的框架下，我们从微观的角度讨论了时间域和空间域里的自旋弛豫机制。

我们研究了半导体量子阱体系中的自旋弛豫。首先我们从实验和理论上研究了室温下本征的 (001) GaAs 量子阱中电子的自旋弛豫。我们用包含了 D'yakonov-Perel' 和 Bir-Aronov-Pikus 自旋弛豫机制的完全微观的计算很好的重复出了实验观察到自旋弛豫时间对浓度的非单调依赖的现象。接着我们研究了高温下  $n$  型 (001) GaAs 量子阱中在量子阱平面存在大电场情况下的涉及多能谷的电子自旋弛豫。我们的研究表明，由于  $L$  能谷大的自旋轨道耦合以及强的  $\Gamma-L$  能谷间的电声散射， $L$  能谷促进了整个系统的自旋弛豫，同时  $L$  能谷和  $\Gamma$  能谷具有相同的自旋弛豫速率和进动频率。我们还研究了 (001) 方向生长的加了应力和门电压的 Si/Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> 和 Ge/Si<sub>0.3</sub>Ge<sub>0.7</sub> 量子阱中空穴的自旋弛豫。我们首先从六带的 Luttinger  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量出发，利用子带的 Löwdin 微扰理论得到了量子阱中最低空穴子带的有效哈密顿量，包括 Rashba 自旋轨道耦合。我们发现，在施加单轴应力的 Si/SiGe (Ge/SiGe) 量子阱中，最低的空穴子带是轻 (重) 空穴型的。在我们所考察的温度、空穴/杂质浓度和门电压范围内，对于 Si/SiGe (Ge/SiGe) 量子阱，计算得到的自旋弛豫时间在 1~100 ps (0.1~10 ps)。我们的研究还表明，空穴一声子的散射很弱，从而突出了库仑散射的重要性。在没有杂质时，在两种量子阱中，库仑散射在自旋弛豫时间对温度的依赖中导致了一个峰，它出现在从简并区到非简并区的过渡位置。最后，我们研究了  $n$  型 (001) GaAs 量子阱中考虑了非平衡纵向光学声子的热电子的自旋弛豫。我们发现，和将声子处理成平衡态的情形比起来，声子数目增加，同时电子热化加强，这些都使得电声散射变强，从而使得自旋弛豫时间变长。

我们接着研究了对称的 Si/SiGe 量子阱中的自旋输运。在这个系统中没有 D'yakonov-Perel' 弛豫机制，但是我们在量子阱平面内加了磁场。通过这个研究，我们再一次强调，即使没有 Dresselhaus 或者 Rashba 自旋轨道耦合提供动量依赖的有效磁场，单独的静磁场也可以在输运过程中造成空间域自旋进动的非均匀扩展。这个非均匀扩展，连

---

---

同散射，导致自旋输运过程中不可逆的自旋弛豫。

除了半导体，我们还考察了石墨烯中的自旋弛豫，以试图理解石墨烯中的主要弛豫机制。我们考虑了附着原子的效应。附着原子被认为可以局域上非常可观地增强 Rashba 自旋轨道耦合，同时也提供库仑散射中心。由于附着原子分布的随机性，Rashba 场实际上也是空间涨落的。这种随机的 Rashba 场通过造成自旋翻转散射贡献自旋的弛豫，因此表现出一种类似 Elliot-Yafet 的自旋弛豫机制。在我们的研究中，D'yakonov-Perel' 和这种 Elliot-Yafet 的自旋弛豫机制都被考虑了进来。通过拟合和比较 Groningen 的小组 [285] 和 Riverside 的小组的实验 [286, 287]（这些实验中有的体现 D'yakonov-Perel' 机制表现的常规性质，即自旋弛豫率和动量弛豫率成反比，而有的体现 Elliott-Yafet 机制表现的常规性质，即自旋弛豫率和动量弛豫率成正比），我们倾向于认为 D'yakonov-Perel' 弛豫机制在石墨烯中占主导。Jo 等人观察到的自旋弛豫时间随扩散系数的非单调的依赖性质 [288] 也被我们的模型很好地重复出来。在这个研究的最后，我们对石墨烯中自旋弛豫的实验研究的最新进展进行了介绍，并对可能主导的自旋弛豫机制重新进行了讨论。我们还研究了低迁移率波纹状石墨烯中的自旋弛豫。结构的弯曲不仅导致局域的 Rashba 自旋轨道耦合，而且还在两个谷中引入方向相反的有效静磁场，从而导致谷间的非均匀扩展。室温附近，在谷间电声散射的作用下，自旋会非常有效地弛豫。

接着我们在 D'yakonov-Perel' 机制的框架下，研究了石墨烯中的自旋输运。我们假设 Rashba 自旋轨道耦合被涨落的衬底和附着原子大大增强。通过拟合 Pi 等人用 Au 原子进行表面掺杂得到的自旋弛豫时间对 Au 原子浓度的依赖 [286]，我们发现随着 Au 原子浓度的变大，Rashba 自旋轨道耦合的系数从 0.15 增到 0.23 meV。利用这个强的自旋轨道耦合下，我们研究了石墨烯中的自旋输运。我们得到的输运长度和实验值可比，都在微米量级。我们发现，在强的散射极限（这里电子-杂质散射占主导），自旋的扩散仅仅由 Rashba 自旋轨道耦合强度决定，而对温度、电子浓度和散射不敏感。但是，当沿着自旋注入的方向施加电场时，自旋输运的长度可以被电场或者电子浓度调节。同时，我们的研究还表明，自旋输运对于注入的自旋的极化方向有各向异性的依赖。这个各向异性不同于由简单的两分量漂移-扩散模型给出的各向异性。

在研究完石墨烯中的自旋动力学后，我们还研究了拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的表面态在高电场下（可达几个 kV/cm）的热电子输运和自旋弛豫。在该表面上，除非温度特别低，电子-表面光学声子的散射占主导。我们发现，由于导带和价带的自旋混合，电场除了在各个带内加速电子，还会导致带间的进动。在有电场的情况下，电子可以通过带间的电声散射和带间的进动从价带转移到导带。另外，我们还发现，由于自旋-动量的锁定，电场会导致一个平面内横向的自旋极化，其幅度与动量散射时间成正比。我们的研究还表明由于库仑散射非常弱，在电场驱动下电子不能建立具有统一的热电子温度的漂移的费米分布。当我们在稳态时把电场撤掉，热化的电子会冷却到初始的费米分布，但是需要的时间（反映了能量弛豫的速率）非常长（100-1000 ps 的量级）。同时，之前电场下产生的自旋极化也会弛豫，其所用的时间在动量的弛豫时间量

级 (0.01-0.1 ps) 。

最后，我们还在 15 K 的温度下对生长在多铁材料  $\text{TbMnO}_3$  上的  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处二维电子气里的自旋扩散做了研究。我们的研究表明，由于  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  界面处扩散的自旋与  $\text{TbMnO}_3$  里  $\text{Mn}^{3+}$  的螺旋磁矩发生 Heisenberg 交换相互作用，该界面处的二维电子气的自旋扩散长度是有限的，不管注入的自旋的极化方向如何。这个研究表明，之前 Jia 和 Berakdar 的预言，即在这个二维电子气中当注入的自旋的极化与  $\text{TbMnO}_3$  中磁矩的螺旋平面垂直时自旋将不会弛豫 [426]，是不成立的。

## 附录A Si/SiGe 和 Ge/SiGe 量子阱中空穴子带包络函数 $\Psi_{\lambda\alpha n}$ 的求解

包络函数  $\Psi_{\lambda\alpha n}(z)$  ( $\lambda=1, 2; \alpha=h, l, s$ ) 满足本征方程

$$H_0\Psi_{\lambda\alpha n}(z) = E_n^{(\alpha)}\Psi_{\lambda\alpha n}(z) \quad (\text{A.1})$$

其中  $H_0 = H_L^{(0)} + H_\epsilon + V(z)I_6$ 。  $\Psi_{\lambda hn}(z)$  只有一个分量  $\chi_n^{(h)}$ ，它满足  $[\frac{\hbar^2}{2m_z^{(h)}}\frac{d^2}{dz^2} + V(z)]\chi_n^{(h)}(z) = E_n^{(h)}\chi_n^{(h)}(z)$ ，其中  $m_z^{(h)} = m_0/(A - B)$ 。这个方程可以直接求解。包络函数  $\Psi_{\lambda\beta n}(z)$  ( $\beta = l, s$ ) 有两个分量， $\chi_n^{(\beta 1)}$  和  $\chi_n^{(\beta 2)}$  满足

$$H_0^{(ls)} \begin{pmatrix} \chi_n^{(\beta 1)}(z) \\ \chi_n^{(\beta 2)}(z) \end{pmatrix} = E_n^{(\beta)} \begin{pmatrix} \chi_n^{(\beta 1)}(z) \\ \chi_n^{(\beta 2)}(z) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

这里

$$H_0^{(ls)} = \begin{pmatrix} (A+B)\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dz^2} & -\sqrt{2}B\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dz^2} \\ -\sqrt{2}B\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dz^2} & A\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dz^2} - \Delta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E_\epsilon & -\frac{E_\epsilon}{\sqrt{2}} \\ -\frac{E_\epsilon}{\sqrt{2}} & \frac{E_\epsilon}{2} \end{pmatrix} + V(z)I_2, \quad (\text{A.3})$$

这里等号右边第二项来自双轴应力的贡献 [335–337, 357]。  $E_\epsilon = -2b(2c_{12}/c_{11} + 1)\delta$ ，其中  $c_{11}$  和  $c_{12}$  是弹性系数， $b$  是形变势常数， $\delta$  是界面处的晶格不匹配度 [355, 357]。对于 Si/Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> ( Ge/Si<sub>0.3</sub>Ge<sub>0.7</sub> ) 量子阱， $E_\epsilon$  是 95.8 meV ( -115.7 meV )。  $\Delta$  是自旋轨道劈裂。满足  $\langle \chi_n^{(\beta 1)}(z) | \chi_n^{(\beta 1)}(z) \rangle > \langle \chi_n^{(\beta 2)}(z) | \chi_n^{(\beta 2)}(z) \rangle$  的解对应类轻空穴型的 LH 态，因而  $\beta$  标记为  $l$ 。否则视为类自旋劈裂型的态， $\beta = s$ 。

用使方程 (A.3) 中的应力项对角化的么正变换作用到方程 (A.2) 上，我们得到

$$\tilde{H}_0^{(ls)} = U^{-1}H_0^{ls}U = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2}{dz^2} + E_1 & -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} & \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{d^2}{dz^2} + E_2 \end{pmatrix} + V(z)I_2. \quad (\text{A.4})$$

这里

$$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{N_1}} & \frac{1}{\sqrt{N_2}} \\ \sqrt{\frac{2}{N_1}}(1 - \frac{E_1}{E_\epsilon}) & \sqrt{\frac{2}{N_2}}(1 - \frac{E_2}{E_\epsilon}) \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

是么正矩阵，其中  $E_1 = \frac{1}{2}(\frac{3}{2}E_\epsilon - \Delta + \sqrt{9E_\epsilon^2/4 + \Delta E_\epsilon + \Delta^2})$ ， $E_2 = \frac{1}{2}(\frac{3}{2}E_\epsilon - \Delta - \sqrt{9E_\epsilon^2/4 + \Delta E_\epsilon + \Delta^2})$  以及  $N_{1,2} = 1 + 2(1 - E_{1,2}/E_\epsilon)^2$ 。方程 (A.4) 中的  $m_1$ ， $m_2$  和  $m^*$  满足

$$m_1 = m_0 \left[ A + B \left( \frac{1}{2} + \frac{9E_\epsilon/4 + \Delta/2}{\sqrt{9E_\epsilon^2/4 + \Delta E_\epsilon + \Delta^2}} \right) \right]^{-1}, \quad (\text{A.6})$$

$$m_2 = m_0 \left[ A + B \left( \frac{1}{2} - \frac{9E_\epsilon/4 + \Delta/2}{\sqrt{9E_\epsilon^2/4 + \Delta E_\epsilon + \Delta^2}} \right) \right]^{-1}, \quad (\text{A.7})$$

$$m^* = m_0 \frac{E_\epsilon \sqrt{9/4 + \Delta/E_\epsilon + (\Delta/E_\epsilon)^2}}{\sqrt{2}\Delta B}. \quad (\text{A.8})$$

注意到关于有效质量的方程 (A.6)-(A.8) 对于 Si/SiGe 量子阱 ( $E_\epsilon > 0$ ) 和 Ge/SiGe 量子阱 ( $E_\epsilon < 0$ ) 都成立。而文献 [329] 中的方程 (5-6) 只有在  $E_\epsilon > 0$  时与方程 (A.6)-(A.8) 等价，因而前者只对 Si/SiGe 量子阱成立。

$\tilde{H}_0^{(ls)}$  可以被拆为对角部分  $\tilde{H}_{0D}^{(ls)}$  和非对角部分  $\tilde{H}_{0O}^{(ls)}$ 。在非简并微扰方法中， $\tilde{H}_{0O}^{(ls)}$  被处理成微扰项。 $\tilde{H}_{0D}^{(ls)}$  的本征方程可以直接求解，其本征值  $E_{n1}$  和  $E_{n2}$  以及相对应的本征函数

$$\begin{pmatrix} \chi_{n1}(z) \\ 0 \end{pmatrix} \text{ 和 } \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_{n2}(z) \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

由薛定谔方程  $[\frac{\hbar^2}{2m_\xi} \frac{d^2}{dz^2} + E_\xi + V(z)]\chi_{n\xi}(z) = E_{n\xi}\chi_{n\xi}(z)$  ( $\xi = 1, 2$ ) 决定。这里，我们称  $\tilde{H}_{0D}^{(ls)}$  的本征态为“未微扰的子带”。

在关于  $\tilde{H}_{0O}^{(ls)}$  的一阶微扰下，微扰的本征值为  $E_n^{(1)} = E_{n1}$  及  $E_n^{(2)} = E_{n2}$ ，相应的微扰的本征态分别为

$$\begin{pmatrix} \chi_{n1}(z) \\ \sum_{n'} \frac{w_{n'2n1}}{E_{n1} - E_{n'2}} \chi_{n'2}(z) \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

和

$$\begin{pmatrix} \sum_{n'} \frac{w_{n'1n2}}{E_{n2} - E_{n'1}} \chi_{n'1}(z) \\ \chi_{n2}(z) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.11})$$

这里  $w_{n\xi n'\xi'} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \chi_{n\xi} \frac{d^2 \chi_{n'\xi'}}{dz^2}$  ( $\xi, \xi' = 1, 2$ )。最终， $H_0^{(ls)}$  的本征值  $E_n^{(\beta)}$  为  $E_n^{(1)}$  和  $E_n^{(2)}$ ，而对应的本征函数  $(\chi_n^{(\beta 1)}(z), \chi_n^{(\beta 2)}(z))^T$  为

$$U \begin{pmatrix} \chi_{n1}(z) \\ \sum_{n'} \frac{w_{n'2n1}}{E_{n1} - E_{n'2}} \chi_{n'2}(z) \end{pmatrix} \quad (\text{A.12})$$

---

和

$$U \left( \begin{array}{c} \sum_{n'} \frac{w_{n'1n2}}{E_{n2}-E_{n1}} \chi_{n'1}(z) \\ \chi_{n2}(z) \end{array} \right). \quad (\text{A.13})$$

注意到非简并微扰方法在仅考虑能量为  $E_{01}$  和  $E_{02}$  的两个子带（即，能量最低的未微扰的对应于类 LH 型和类 SO 型的空穴态）时才成立。否则，当更多的子带被考虑时，如果某两个能级  $E_{n1}$  和  $E_{n'2}$  非常接近，计算中可能会导致发散，因为在包络函数  $\Psi_{\lambda xn}(z)$  ( $x = l$  和  $s$ ) 中有正比于  $\frac{1}{E_{n1}-E_{n'2}}$  的项 [参考方程 (A.12)-(A.13)]。但是为了保证收敛，考虑足够多的子带是必要的。因此，作为非简并微扰方法的替代，我们在取由方程 (A.9) 组成的足够多数目的基下，应用严格对角化方法来得到  $\tilde{H}_0^{(ls)}$  的本征态。



## 参考文献

- [1] *Optical Orientation*, edited by F. Meier and B. P. Zakharchenya (North-Holland, 1984).
- [2] S. D. Sarma, J. Fabian, X. D. Hu, and I. Žutić, *Solid State Commun.* **119**, 207 (2001).
- [3] J. F. Gregg, I. Petej, E. Jouguelet, and C. Dennis, *J. Phys. D.: Appl. Phys.* **35**, R121 (2002).
- [4] *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*, edited by D. D. Awschalom, D. Loss, and N. Samarth (Springer, Berlin, 2002).
- [5] I. Žutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [6] W. J. M. Naber, S. Faez, and W. G. V. D. Wiel, *J. Phys. D.: Appl. Phys.* **40**, R205 (2007).
- [7] D. D. Awschalom and M. E. Flatté, *Nat. Phys.* **3**, 153 (2007).
- [8] J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, and I. Žutić, *Acta Phys. Slov.* **57**, 565 (2007).
- [9] Manuel Bibes and Agnès Barthélémy, *IEEE T-ED* **54**, 1003 (2007).
- [10] M. I. D'yakonov, *Spin Physics in Semiconductors* (Springer, Berlin, 2008).
- [11] M. W. Wu, J. H. Jiang, and M. Q. Weng, *Phys. Rep.* **493**, 61 (2010).
- [12] S. D. Bader and S. S. P. Parkin, *Annu. Rev. Cond. Matter Phys.* **1**, 71 (2010).
- [13] M. Shiraishi and T. Ikoma, *Physica E* **43**, 1295 (2011).
- [14] 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).
- [15] G. Lampel, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 491 (1968).
- [16] R. R. Parsons, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 1152 (1969).
- [17] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
- [18] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn, *Phys. Rev. B* **39**, 4828 (1989).
- [19] B. Dieny, V. S. Speriosu, S. S. P. Parkin, B. A. Gurney, D. R. Wilhoit, and D. Mauri, *Phys. Rev. B* **43**, 1297 (1991).
- [20] A. H. MacDonald and M. Tsoi, *Phil. Trans. R. Soc. A* **369**, 3098 (2011).
- [21] S. Gardelis, J. Androulakis, P. Migiakis, and J. Giapintzakis, *Mater. Sci. Forum* **455-456**, 137 (2004).
- [22] R. von Helmolt, J. Wecker, B. Holzapfel, L. Schultz, and K. Samwer, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2331 (1993).
- [23] J. S. Moodera, Lisa R. Kinder, Terrilyn M. Wong, and R. Meservey, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3273 (1995).
- [24] Terunobu Miyazaki and Nobuki Tezuka, *J. Magn. Magn. Mater.* **151**, 403 (1995).

- 
- [25] T. Zhou, D. R. Hines, and S. A. Solin, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 667 (2001).
- [26] G. C. Xiong, Q. Li, H. L. Ju, S. N. Mao, L. Senapati, X. X. Xi, R. L. Greene, and T. Venkatesan, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 1427 (1995).
- [27] N. F. Mott, *Proc. R. Soc. Lond. A* **153**, 699 (1936).
- [28] J. C. Slonczewski, *J. Magn. Magn. Mater.* **159**, L1 (1996).
- [29] L. Berger, *Phys. Rev. B* **54**, 9353 (1996).
- [30] M. Tsoi, A. G. M. Jansen, J. Bass, W.-C. Chiang, M. Seck, V. Tsoi, and P. Wyder, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4281 (1998).
- [31] J. A. Katine, F. J. Albert, R. A. Buhrman, E. B. Myers, and D. C. Ralph, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3149 (2000).
- [32] M. Tsoi, A. G. M. Jansen, J. Bass, W. C. Chiang, V. Tsoi, and P. Wyder, *Nature* **406**, 46 (2000).
- [33] D. C. Ralph and M. D. Stiles, *J. Magn. Magn. Mater.* **320**, 1190 (2008).
- [34] S. O. Valenzuela and M. Tinkham, *Nature* **442**, 176 (2006).
- [35] J. A. Katine and E. E. Fullerton, *J. Magn. Magn. Mater.* **320**, 1217 (2008).
- [36] J. Z. Sun and D. C. Ralph, *J. Magn. Magn. Mater.* **320**, 1227 (2008).
- [37] K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibae, K. Ando, S. Maekawa, and E. Saitoh, *Nature* **455**, 778 (2008).
- [38] E. M. Hankiewicz, Jian Li, Tomas Jungwirth, Qian Niu, Shun-Qing Shen, and Jairo Sinova, *Phys. Rev. B* **72**, 155305 (2005).
- [39] A. A. Bakun, B. P. Zakharchenya, A. A. Rogachev, M. N. Tkachuk, and V. G. Fleisher, *JETP Lett.* **40**, 1293 (1984).
- [40] E. Saitoh, M. Ueda, H. Miyajima, and G. Tatara, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 182509 (2006).
- [41] Jiang Xiao, Gerrit E. W. Bauer, Ken-ichi Uchida, Eiji Saitoh, and Sadamichi Maekawa, *Phys. Rev. B* **81**, 214418 (2010).
- [42] H. Adachi, K. Uchida, E. Saitoh, J. Ohe, S. Takahashi, and S. Maekawa, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 252506 (2010).
- [43] C. M. Jaworski, J. Yang, S. Mack, D. D. Awschalom, J. P. Heremans, and R. C. Myers, *Nat. Mater.* **9**, 898 (2010).
- [44] Jairo Sinova, *Nat. Mater.* **9**, 880 (2010).
- [45] C. L. Jia and J. Berakdar, *Phys. Rev. B* **83**, 180401 (2011).
- [46] Jun-ichiro Ohe, Hiroto Adachi, Saburo Takahashi, and Sadamichi Maekawa, *Phys. Rev. B* **83**, 115118 (2011).
- [47] C. M. Jaworski, J. Yang, S. Mack, D. D. Awschalom, R. C. Myers, and J. P. Heremans, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 186601 (2011).
- [48] K. Uchida, J. Xiao, H. Adachi, J. Ohe, S. Takahashi, J. Ieda, T. Ota, Y. Kajiwara, H. Umezawa, H. Kawai, G. E. W. Bauer, S. Maekawa, and E. Saitoh, *Nat. Mater.* **9**, 894 (2010).
- [49] K. Uchida, T. Ota, K. Harii, S. Takahashi, S. Maekawa, Y. Fujikawa, and E. Saitoh, *Solid State Commun.* **150**, 524 (2010).

- 
- [50] Gerrit E. W. Bauer, Eiji Saitoh, and Bart J. van Wees, *Nat. Mater.* **11**, 391 (2012).
- [51] T. Korn, *Phys. Rep.* **494**, 415 (2010).
- [52] G. E. Moore, *Electronics* **38**, 114 (1965).
- [53] S. Datta and B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).
- [54] K. C. Hall, W. H. Lau, K. Gündogdu, M. E. Flatté, and T. F. Boggess, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2937 (2003).
- [55] M. E. Flatté and G. Vignale, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1273 (2001).
- [56] M. E. Flatté and G. Vignale, *J. Appl. Phys.* **97**, 104508 (2005).
- [57] M. Deutsch, G. Vignale, and M. E. Flatté, *J. Appl. Phys.* **96**, 7424 (2004).
- [58] Jaroslav Fabian, Igor Žutić, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **66**, 165301 (2002).
- [59] I. Žutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 066603 (2002).
- [60] P. Chen, J. Moser, P. Kotissek, J. Sadowski, M. Zenger, D. Weiss, and W. Wegscheider, *Phys. Rev. B* **74**, 241302 (2006).
- [61] M. E. Flatté, Z. G. Yu, E. Johnston-Halperin, and D. D. Awschalom, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 4740 (2003).
- [62] J. Fabian, I. Žutić, and S. D. Sarma, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 85 (2004).
- [63] I. Appelbaum, B. Huang, and D. J. Monsma, *Nature* **447**, 295 (2007).
- [64] B. Huang, D. J. Monsma, and I. Appelbaum, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 072501 (2007).
- [65] D. J. Monsma, J. C. Lodder, Th. J. A. Popma, and B. Dieny, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 5260 (1995).
- [66] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *J. Phys. C* **17**, 6039 (1984).
- [67] Y. Ohno, D. K. Young, B. Beschoten, F. Matsukura, H. Ohno, and D. D. Awschalom, *Nature* **402**, 790 (1999).
- [68] R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag, and L. W. Molenkamp, *Nature* **402**, 787 (1999).
- [69] A. T. Hanbicki, B. T. Jonker, G. Itskos, G. Kioseoglou, and A. Petrou, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 1240 (2002).
- [70] C. Adelman, X. Lou, J. Strand, C. J. Palmstrøm, and P. A. Crowell, *Phys. Rev. B* **71**, 121301 (2005).
- [71] S. A. Crooker, M. Furis, X. Lou, C. Adelman, D. L. Smith, C. J. Palmstrøm, and P. A. Crowell, *Science* **309**, 2191 (2005).
- [72] 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).
- [73] J. M. Kikkawa, I. P. Smorchkova, N. Samarth, and D. D. Awschalom, *Science* **277**, 1284 (1997).
- [74] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4313 (1998).
- [75] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1834 (1999).
- [76] S. Murakami, N. Nagaosa, and S. C. Zhang, *Science* **301**, 1348 (2003).
- [77] Jairo Sinova, Dimitrie Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126603 (2004).

- 
- [78] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Science* **306**, 1910 (2004).
- [79] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova, and T. Jungwirth, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 047204 (2005).
- [80] M. Yamanouchi, D. Chiba, F. Matsukura, and H. Ohno, *Nature* **428**, 539 (2004).
- [81] H. C. Koo, J. H. Kwon, J. Eom, J. Chang, S. H. Han, and M. Johnson, *Science* **325**, 1515 (2009).
- [82] S. Bandyopadhyay, arXiv:0911.0210.
- [83] A. N. M. Zainuddin, S. Hong, L. Siddiqui, S. Srinivasan, and S. Datta, *Phys. Rev. B* **84**, 165306 (2011).
- [84] P. Agnihotri and S. Bandyopadhyay, *Physica E* **42**, 1736 (2010).
- [85] B. Y. Sun, P. Zhang, and M. W. Wu, *Semicond. Sci. Technol.* **26**, 075005 (2011).
- [86] D. D. Awschalom and N. Samarth, *J. Magn. Magn. Mater.* **200**, 130 (1999).
- [87] T. Dietl, *Semicond. Sci. Technol.* **17**, 17 (2002).
- [88] N. Samarth, S. H. Chun, K. C. Ku, S. J. Potashnik, and P. Schiffer, *Solid State Commun.* **127**, 173 (2003).
- [89] H. Ohno, D. Chiba, F. Matsukura, T. Omiya, E. Abe, T. Dietl, Y. Ohno, and K. Ohtani, *Nature* **408**, 944 (2000).
- [90] D. Chiba, M. Yamanouchi, F. Matsukura, and H. Ohno, *Science* **301**, 943 (2003).
- [91] H. Ohno, *Nat. Mater.* **9**, 952 (2010).
- [92] Ahsan M. Nazmul, S. Sugahara, and M. Tanaka, *Phys. Rev. B* **67**, 241308 (2003).
- [93] H. L. Wang, L. Chen, and J. H. Zhao, *Sci. China: Phys. Mech. Astron.* **56**, 99 (2013).
- [94] M. A. Ruderman and C. Kittel, *Phys. Rev* **96**, 99 (1954).
- [95] T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956).
- [96] K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957).
- [97] H. Ohno, F. Matsukura, A. Shen, Y. Sugawara, N. Akiba, and T. Kuroiwa, *Physica E* **2**, 904 (1998).
- [98] L. Chen, X. Yang, F. H. Yang, J. H. Zhao, J. Misuraca, P. Xiong, and S. von Molnár, *Nano Lett.* **11**, 2584 (2011).
- [99] K. W. Edmonds, K. Y. Wang, R. P. Champion, A. C. Neumann, N. R. S. Farley, B. L. Gallagher, and C. T. Foxon, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 4991 (2002).
- [100] Jian-Ming Tang, Jeremy Levy, and Michael E. Flatté, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 106803 (2006).
- [101] Naoto Nagaosa, Jairo Sinova, Shigeaki Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1539 (2010).
- [102] H. Toyosaki, T. Fukumura, Y. Yamada, K. Nakajima, T. Chikyow, T. Hasegawa, H. Koinuma, and M. Kawasaki, *Nat. Mater.* **3**, 221 (2004).
- [103] H. X. Tang, R. K. Kawakami, D. D. Awschalom, and M. L. Roukes, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 107201 (2003).
- [104] S. Sanvito, *Nat. Mater.* **6**, 803 (2007).
- [105] Clément Barraud, Pierre Seneor, Richard Mattana, Stéphane Fusil, Karim Bouzehouane, Cyrille Deranlot, Patrizio Graziosi, Luis Hueso, Ilaria Bergenti, Valentin Dediu, Frédéric

- Petroff, and Albert Fert, *Nat. Phys.* **6**, 615 (2010).
- [106] F. J. Wang, Z. H. Xiong, D. Wu, J. Shi, and Z. V. Vardeny, *Synth. Met.* **155**, 172 (2005).
- [107] S. Sanvito, *J. Mater. Chem.* **17**, 4455 (2007).
- [108] Z. Valy Vardeny, Alan J. Heeger, and Ananth Dodabalapur, *Synth. Met.* **148**, 1 (2005).
- [109] V. I. Krinichnyi, *Synth. Met.* **108**, 173 (2000).
- [110] S. Pramanik, C. G. Stefanita, S. Patibandla, S. Bandyopadhyay, K. Garre, N. Harth, and M. Cahay, *Nat. Nanotechnol.* **2**, 216 (2007).
- [111] Fujian Wang and Z. Valy Vardeny, *J. Mater. Chem.* **19**, 1685 (2009).
- [112] V. Dediu, M. Murgia, F. C. Maticotta, C. Taliani, and S. Barbanera, *Solid State Commun.* **122**, 181 (2002).
- [113] Z. H. Xiong, Di Wu, Z. Valy Vardeny, and Jing Shi, *Nature* **427**, 821 (2004).
- [114] N. A. Morley, A. Rao, D. Dhandapani, M. R. J. Gibbs, M. Grell, and T. Richardson, *J. Appl. Phys.* **103**, 07F306 (2008).
- [115] G. Veeraraghavan, T. D. Nguyen, Y. Sheng, O. Mermer, and M. Wohlgenannt, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 036209 (2007).
- [116] O. Mermer, G. Veeraraghavan, T. Francis, Y. Sheng, D. T. Nguyen, M. Wohlgenannt, A. Kohler, M. Al-Suti, and M. Khan, *Phys. Rev. B* **72**, 205202 (2005).
- [117] Y. Sheng, T. D. Nguyen, G. Veeraraghavan, Ö. Mermer, M. Wohlgenannt, S. Qiu, and U. Scherf, *Phys. Rev. B* **74**, 045213 (2006).
- [118] V. Prigodin, J. Bergeson, D. Lincoln, and A. Epstein, *Synth. Met.* **156**, 757 (2006).
- [119] P. A. Bobbert, T. D. Nguyen, F. W. A. van Oost, B. Koopmans, and M. Wohlgenannt, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216801 (2007).
- [120] Pratik Desai, P. Shakya, T. Kreuzis, W. P. Gillin, N. A. Morley, and M. R. J. Gibbs, *Phys. Rev. B* **75**, 094423 (2007).
- [121] C. M. Schneider, B. Zhao, R. Kozhuharova, S. Groudeva-Zotova, T. Mühl, M. Ritschel, I. Mönch, H. Vinzelberg, D. Elefant, A. Graff, A. Leonhardt, and J. Fink, *Diamond Related Mater.* **13**, 215 (2004).
- [122] Alexandre R. Rocha, Víctor M. García-Suárez, Steve W. Bailey, Colin J. Lambert, Jaime Ferrer, and Stefano Sanvito, *Nat. Mater.* **4**, 335 (2005).
- [123] L. Bogani and W. Wernsdorfer, *Nat. Mater.* **7**, 179 (2008).
- [124] S. Sanvito and A. R. Rocha, *J. Comp. Theo. Nanoscience* **3**, 624 (2006).
- [125] M. Mas-Torrent, N. Crivillers, V. Mugnaini, I. Ratera, C. Rovira, and J. Veciana, *J. Mater. Chem.* **19**, 1691 (2009).
- [126] S. Sanvito, *Nat. Phys.* **6**, 562 (2010).
- [127] M. Zwolak and M. D. Ventra, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 925 (2002).
- [128] X. Wang and T. Chakraborty, *Phys. Rev. B* **74**, 193103 (2006).
- [129] D. W. Kang, Z. Qu, H. Jiang, and S. J. Xie, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 578 (2010).
- [130] B. Göhler, V. Hamelbeck, T. Z. Markus, M. Kettner, G. F. Hanne, Z. Vager, R. Naaman, and H. Zacharias, *Science* **331**, 894 (2011).
- [131] Z. Xie, T. Z. Markus, S. R. Cohen, Z. Vager, R. Gutierrez, and R. Naaman, *Nano Lett.*

- 11**, 4652 (2011).
- [132] A. M. Guo and Q. F. Sun, Phys. Rev. Lett. **108**, 218102 (2012).
- [133] A. M. Guo and Q. F. Sun, Phys. Rev. B **86**, 115441 (2012).
- [134] R. Gutierrez, E. Diaz, R. Naaman, and G. Cuniberti, Phys. Rev. B **85**, 081404 (2012).
- [135] D. Vager and Z. Vager, Phys. Lett. A **376**, 1895 (2012).
- [136] E. Medina, F. López, M. A. Ratner, and V. Mujica, Europhys. Lett. **99**, 17006 (2012).
- [137] A. M. Guo and Q. F. Sun, Phys. Rev. B **86**, 035424 (2012).
- [138] A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nature Mater. **6**, 183 (2007).
- [139] C. W. J. Beenakker, Rev. Mod. Phys. **80**, 1337 (2008).
- [140] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
- [141] N. M. R. Peres, Rev. Mod. Phys. **82**, 2673 (2010).
- [142] A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **83**, 851 (2011).
- [143] V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, Rev. Mod. Phys. **84**, 1067 (2012).
- [144] Dmytro Pesin and Allan H. MacDonald, Nat. Mater. **11**, 409 (2012).
- [145] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **98**, 106803 (2007).
- [146] H. J. Zhang, C. X. Liu, X. L. Qi, Z. Fang, X. Dai, and S. C. Zhang, Nat. Phys. **5**, 438 (2009).
- [147] M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
- [148] X. L. Qi and S. C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
- [149] D. Culcer, Physica E **44**, 860 (2012).
- [150] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, Nat. Phys. **5**, 398 (2009).
- [151] H. Beidenkopf, P. Roushan, J. Seo, L. Gorman, I. Drozdov, Y. SanHor, R. J. Cava, and A. Yazdani, Nat. Phys. **7**, 939 (2011).
- [152] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J. H. Chu, Z. K. Liu, S. K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z. X. Shen, Science **325**, 178 (2009).
- [153] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, F. Meier, J. H. Dil, J. Osterwalder, L. Patthey, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, Phys. Rev. Lett. **103**, 146401 (2009).
- [154] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, J. H. Dil, F. Meier, J. Osterwalder, L. Patthey, J. G. Checkelsky, N. P. Ong, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, Nature **460**, 1101 (2009).
- [155] D. Kim, S. Cho, N. P. Butch, P. Syers, K. Kirshenbaum, S. Adam, J. Paglione, and M. S. Fuhrer, Nat. Phys. **8**, 459 (2012).
- [156] S. S. Hong, J. J. Cha, D. Kong, and Y. Cui, Nat. Commun. **3**, 757 (2012).
- [157] G. A. Fiete, V. Chua, M. Kargarian, R. Lundgren, A. Rüegg, J. Wen, and V. Zyuzin, Physica E **44**, 845 (2012).

- 
- [158] J. G. Analytis, R. D. McDonald, S. C. Riggs, J. H. Chu, G. S. Boebinger, and I. R. Fisher, *Nat. Phys.* **6**, 960 (2010).
- [159] M. Z. Hasan and J. E. Moore, *Ann. Rev. Cond. Matt. Phys.* **2**, 55 (2011).
- [160] Yufeng Tian, Saidur Rahman Bakaul, and Tom Wu, *Nanoscale* **4**, 1529 (2012).
- [161] H Béa, M Gajek, M Bibes, and a Barthélémy, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 434221 (2008).
- [162] H. Béa, M. Bibes, M. Sirena, G. Herranz, K. Bouzehouane, E. Jacquet, S. Fusil, P. Paruch, M. Dawber, J.-P. Contour, and A. Barthélémy, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 062502 (2006).
- [163] Markus König, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Taylor Hughes, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 031007 (2008).
- [164] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
- [165] B. Andrei Bernevig and Shou-Cheng Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 106802 (2006).
- [166] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
- [167] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
- [168] Conan Weeks, Jun Hu, Jason Alicea, Marcel Franz, and Ruqian Wu, *Phys. Rev. X* **1**, 021001 (2011).
- [169] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W Molenkamp, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
- [170] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Nature* **452**, 970 (2008).
- [171] Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Ewelina M. Hankiewicz, Laurens W. Molenkamp, Joseph Maciejko, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang, *Nat. Phys.* **8**, 485 (2012).
- [172] R. Hanson, J. R. Petta, S. Tarucha, and L. M. K. Vandersypen, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1217 (2007).
- [173] M. E. Flatté, in *Manipulating Quantum Coherence in Solid State Systems*, Vol. 244 of *NATO Science Series II: Mathematics, Physics and Chemistry*, edited by M. E. Flatté and I. Tifrea (Springer Netherlands, 2007), pp. 1–52.
- [174] I. A. Merkulov, A. L. Efros, and M. Rosen, *Phys. Rev. B* **65**, 205309 (2002).
- [175] W. A. Coish and D. Loss, *Phys. Rev. B* **70**, 195340 (2004).
- [176] A. V. Khaetskii, D. Loss, and L. Glazman, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 186802 (2002).
- [177] M. Xiao, M. G. House, and H. W. Jiang, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 096801 (2010).
- [178] L. Wang, K. Shen, B. Y. Sun, and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **81**, 235326 (2010).
- [179] P. Recher and B. Trauzettel, *Nanotechnology* **21**, 302001 (2010).
- [180] M. Droth and G. Burkard, arXiv:1303.2027.
- [181] D. Loss and D. P. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* **57**, 120 (1998).
- [182] D. Reiter, T. Kuhn, and V. Axt, *Phys. Rev. B* **83**, 155322 (2011).
- [183] F. Jelezko, T. Gaebel, I. Popa, A. Gruber, and J. Wrachtrup, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 076401 (2004).
- [184] William F. Koehl, Bob B. Buckley, F. Joseph Heremans, Greg Calusine, and David D.

- Awschalom, *Nature* **479**, 84 (2011).
- [185] C.-M. Hu, Junsaku Nitta, A. Jensen, J. B. Hansen, and Hideaki Takayanagi, *Phys. Rev. B* **63**, 125333 (2001).
- [186] G. Schmidt, D. Ferrand, L. W. Molenkamp, A. T. Filip, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **62**, R4790 (2000).
- [187] A. Fert and H. Jaffrès, *Phys. Rev. B* **64**, 184420 (2001).
- [188] E. I. Rashba, *Phys. Rev. B* **62**, R16267 (2000).
- [189] M. Kohda, T. Kita, Y. Ohno, F. Matsukura, and H. Ohno, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 012103 (2006).
- [190] Takashi Kimura, Naoki Hashimoto, Shinya Yamada, Masanobu Miyao, and Kohei Hamaya, *NPG Asia Mater.* **4**, e9 (2012).
- [191] Saburo Takahashi and Sadamichi Maekawa, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **9**, 014105 (2008).
- [192] Mark Johnson and R. H. Silsbee, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1790 (1985).
- [193] Mark Johnson and R. H. Silsbee, *Phys. Rev. B* **37**, 5312 (1988).
- [194] F. J. Jedema, H. B. Heersche, A. T. Filip, J. J. A. Baselmans, and B. J. van Wees, *Nature* **416**, 713 (2002).
- [195] Xiaohua Lou, Christoph Adelmann, Scott A. Crooker, Eric S. Garlid, Jianjie Zhang, K. S. Madhukar Reddy, Soren D. Flexner, Chris J. Palmstrøm, and Paul A. Crowell, *Nat. Phys.* **3**, 197 (2007).
- [196] N. Tombros, S. J. van der Molen, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **73**, 233403 (2006).
- [197] Tomoyuki Sasaki, Tohru Oikawa, Masashi Shiraishi, Yoshishige Suzuki, and Kiyoshi Noguchi, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 012508 (2011).
- [198] Sergey D. Ganichev, Vasily V. Bel'kov, Sergey a. Tarasenko, Sergey N. Danilov, Stephan Giglberger, Christoph Hoffmann, Eougenious L. Ivchenko, Dieter Weiss, Werner Wegscheider, Christian Gerl, Dieter Schuh, Joachim Stahl, Jo De Boeck, Gustaaf Borghs, and Wilhelm Prettl, *Nat. Phys.* **2**, 609 (2006).
- [199] Bin Zhou and Shun-Qing Shen, *Phys. Rev. B* **75**, 045339 (2007).
- [200] K. G. Hu, *Solid State Commun.* **148**, 283 (2008).
- [201] E. M. Hankiewicz, L. W. Molenkamp, T. Jungwirth, and Jairo Sinova, *Phys. Rev. B* **70**, 241301 (2004).
- [202] C. Brüne, A. Roth, E. G. Novik, M. König, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, W. Hanke, J. Sinova, and L. W. Molenkamp, *Nat. Phys.* **6**, 448 (2010).
- [203] Matthias Scheid, Andreas Pfund, Dario Bercioux, and Klaus Richter, *Phys. Rev. B* **76**, 195303 (2007).
- [204] M. Scheid, D. Bercioux, and K. Richter, *New J. Phys.* **9**, 401 (2007).
- [205] S. Smirnov, D. Bercioux, M. Grifoni, and K. Richter, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 230601 (2008).
- [206] M. E. Flatté, *Nat. Phys.* **4**, 587 (2008).
- [207] M. Scheid, A. Lassel, and K. Richter, *Europhys. Lett.* **87**, 17001 (2009).
- [208] Marius V. Costache and Sergio O. Valenzuela, *Science* **330**, 1645 (2010).
- [209] Y. Zhou and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **86**, 085406 (2012).



- 
- [210] S. M. Frolov, A. Venkatesan, W. Yu, J. A. Folk, and W. Wegscheider, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 116802 (2009).
- [211] Yaroslav Tserkovnyak, Arne Brataas, and Gerrit E. W. Bauer, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 117601 (2002).
- [212] K. Ando, S. Takahashi, J. Ieda, H. Kurebayashi, T. Trypiniotis, C. H. W. Barnes, S. Maekawa, and E. Saitoh, *Nature materials* **10**, 655 (2011).
- [213] O. Mosendz, J. E. Pearson, F. Y. Fradin, G. E. W. Bauer, S. D. Bader, and A. Hoffmann, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 046601 (2010).
- [214] Bret Heinrich, Yaroslav Tserkovnyak, Georg Woltersdorf, Arne Brataas, Radovan Urban, and Gerrit E. W. Bauer, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 187601 (2003).
- [215] A. K. Patra, S. Singh, B. Barin, Y. Lee, J.-H. Ahn, E. del Barco, E. R. Mucciolo, and B. Özyilmaz, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 162407 (2012).
- [216] Zhenyao Tang, Eiji Shikoh, Hiroki Ago, Kenji Kawahara, Yuichiro Ando, Teruya Shinjo, and Masashi Shiraishi, *Phys. Rev. B* **87**, 140401 (2013).
- [217] Jean-Christophe Le Breton, Sandeep Sharma, Hidekazu Saito, Shinji Yuasa, and Ron Jansen, *Nature* **475**, 82 (2011).
- [218] A. H. Clark, R. D. Burnham, D. J. Chadi, and R. M. White, *Phys. Rev. B* **12**, 5758 (1975).
- [219] D. Z. Garbuzov, A. I. Ekimov, and V. I. Safarov, *JETP Lett.* **13**, 24 (1971).
- [220] A. N. Titkov, E. I. Chaikina, E. M. Komova, and N. G. Ermakova, *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* **15**, 345 (1981).
- [221] A. H. Clark, R. D. Burnham, D. J. Chadi, and R. M. White, *Solid State Commun.* **20**, 385 (1975).
- [222] B. T. Jonker, Y. D. Park, B. R. Bennett, H. D. Cheong, G. Kioseoglou, and A. Petrou, *Phys. Rev. B* **62**, 8180 (2000).
- [223] W. Hanle, *Z. Phys.* **30**, 93 (1924).
- [224] Y. Ohno, R. Terauchi, T. Adachi, F. Matsukura, and H. Ohno, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4196 (1999).
- [225] Y. Ohno, R. Terauchi, T. Adachi, F. Matsukura, and H. Ohno, *Physica E* **6**, 817 (2000).
- [226] X. Z. Shang, P. J. Niu, W. L. Guo, W. X. Wang, Q. Huang, and J. M. Zhou, *Physica E* **30**, 36 (2005).
- [227] J. J. Baumberg, D. D. Awschalom, N. Samarth, H. Luo, and J. K. Furdyna, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 717 (1994).
- [228] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, *Nature* **397**, 139 (1999).
- [229] Hideo Kosaka, Hideki Shigyou, Yasuyoshi Mitsumori, Yoshiaki Rikitake, Hiroshi Imamura, Takeshi Kutsuwa, Koichiro Arai, and Keiichi Edamatsu, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 096602 (2008).
- [230] S. A. Crooker, M. Furis, X. Lou, P. A. Crowell, D. L. Smith, C. Adelman, and C. J. Palmstrøm, *J. Appl. Phys.* **101**, 081716 (2007).
- [231] P. Kotissek, M. Bailleul, M. Sperl, A. Spitzer, D. Schuh, W. Wegscheider, C. H. Back, and G. Bayreuther, *Nat. Phys.* **3**, 872 (2007).

- 
- [232] M. Furis, D. L. Smith, S. Kos, E. S. Garlid, K. S. M. Reddy, C. J. Palmstrom, P. A. Crowell, and S. A. Crooker, *New J. Phys.* **9**, 347 (2007).
- [233] S. A. Crooker, D. G. Rickel, A. V. Balatsky, and D. L. Smith, *Nature* **431**, 49 (2004).
- [234] Georg M. Müller, Michael Oestreich, Michael Römer, and Jens Hübner, *Physica E* **43**, 569 (2010).
- [235] M. Oestreich, M. Römer, R. J. Haug, and D. Hägele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 216603 (2005).
- [236] Georg M. Müller, Michael Römer, Dieter Schuh, Werner Wegscheider, Jens Hübner, and Michael Oestreich, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 206601 (2008).
- [237] N. Tombros, S. Tanabe, A. Veligura, C. Józsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 046601 (2008).
- [238] M. Popinciuc, C. Józsa, P. J. Zomer, N. Tombros, A. Veligura, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **80**, 214427 (2009).
- [239] W. Han, K. Pi, W. Bao, K. M. McCreary, Y. Li, W. H. Wang, C. N. Lau, and R. K. Kawakami, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 222109 (2009).
- [240] Saroj P Dash, Sandeep Sharma, Ram S Patel, Michel P de Jong, and Ron Jansen, *Nature* **462**, 491 (2009).
- [241] T. W. Griswold, A. F. Kip, and C. Kittel, *Phys. Rev.* **88**, 951 (1952).
- [242] George Feher and A. F. Kip, *Phys. Rev.* **98**, 337 (1955).
- [243] G. Feher and E. A. Gere, *Phys. Rev.* **114**, 1245 (1959).
- [244] P. H. Rieger, *Electron Spin Resonance: Analysis and Interpretation* (The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2007).
- [245] A. J. Ramsay, S. J. Boyle, R. S. Kolodka, J. B. B. Oliveira, J. Skiba-Szymanska, H. Y. Liu, M. Hopkinson, A. M. Fox, and M. S. Skolnick, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 197401 (2008).
- [246] Y. Zhou and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **82**, 085304 (2010).
- [247] C. Ertler, S. Konschuh, M. Gmitra, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **80**, 041405 (2009).
- [248] R. J. Elliott, *Phys. Rev.* **96**, 266 (1954).
- [249] Yafet, *Phys. Rev.* **85**, 478 (1952).
- [250] M. I. D'yakonov and V. I. Perel', *Zh. Éksp. Teor. Fiz.* **60**, 1954 (1971).
- [251] G. L. Bir, A. G. Aronov, and G. E. Pikus, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **69**, 1382 (1975).
- [252] M. M. Glazov, E. Ya. Sherman, and V. K. Dugaev, *Physica E* **42**, 2157 (2010).
- [253] Albert W. Overhauser, *Phys. Rev.* **89**, 689 (1953).
- [254] Y. Yafet, *Solid State Physics* (Academic Press, 1963), Vol. 14.
- [255] Evan O. Kane, *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 249 (1957).
- [256] J. L. Cheng, M. W. Wu, and J. Fabian, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 016601 (2010).
- [257] Z. Liu, M. O. Nestoklon, J. L. Cheng, E. L. Ivchenko, and M. W. Wu, *Fizika Tverdogo Tela* **55**, 1510 (2013).
- [258] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- [259] M. W. Wu, *J. Phys. Soc. Jpn.* **70**, 2195 (2001).
- [260] Charles P. Slichter, *Principles of magnetic resonance* (Springer-Verlag, 1980).
- [261] Leslie Allen and J. H. Eberly, *Optical resonance and two-level atoms* (Courier Dover Pub-

- lications, 1975).
- [262] H. Haug and A.-P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Springer, 1996).
- [263] A. D. Margulis and Vl. A. Margulis, *Sov. Phys. Solid State* **25**, 918 (1983).
- [264] M. W. Wu and C. Z. Ning, *Eur. Phys. J. B* **18**, 373 (2000).
- [265] J. A. Gupta, D. D. Awschalom, Al. L. Efros, and A. V. Rodina, *Phys. Rev. B* **66**, 125307 (2002).
- [266] J. A. Gupta, D. D. Awschalom, X. Peng, and A. P. Alivisatos, *Phys. Rev. B* **59**, R10421 (1999).
- [267] E. Ya. Sherman, *Phys. Rev. B* **67**, 161303 (2003).
- [268] E. Ya. Sherman, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 209 (2003).
- [269] V. K. Dugaev, E. Ya. Sherman, and J. Barnas, *Phys. Rev. B* **83**, 085306 (2011).
- [270] V. K. Dugaev, E. Ya. Sherman, V. I. Ivanov, and J. Barnas, *Phys. Rev. B* **80**, 081301 (2009).
- [271] Y. Zhou and M. W. Wu, *Europhys. Lett.* **89**, 57001 (2010).
- [272] Changxue Deng and Xuedong Hu, *Phys. Rev. B* **72**, 165333 (2005).
- [273] 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).
- [274] M. Q. Weng and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **66**, 235109 (2002).
- [275] M. Q. Weng and M. W. Wu, *J. Appl. Phys.* **93**, 410 (2003).
- [276] J. L. Cheng and M. W. Wu, *J. Appl. Phys.* **101**, 073702 (2007).
- [277] J. Zhou, J. L. Cheng, and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **75**, 045305 (2007).
- [278] J. Zhou and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **77**, 075318 (2008).
- [279] L. H. Teng, P. Zhang, T. S. Lai, and M. W. Wu, *Europhys. Lett.* **84**, 27006 (2008).
- [280] C. Lü and J. L. Cheng, *Semicond. Sci. Technol.* **24**, 115010 (5pp) (2009).
- [281] C. Lü, J. L. Cheng, and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **73**, 125314 (2006).
- [282] V. N. Gridnev, *JETP Lett.* **74**, 380 (2001).
- [283] C. Grimaldi, *Phys. Rev. B* **72**, 075307 (2005).
- [284] P. Zhang, Y. Zhou, and M. W. Wu, *J. Appl. Phys.* **112**, 073709 (2012).
- [285] C. Józsa, T. Maassen, M. Popinciuc, P. J. Zomer, A. Veligura, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **80**, 241403 (2009).
- [286] K. Pi, W. Han, K. M. McCreary, A. G. Swartz, Y. Li, and R. K. Kawakami, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 187201 (2010).
- [287] W. Han and R. K. Kawakami, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 047207 (2011).
- [288] S. Jo, D. K. Ki, D. Jeong, H. J. Lee, and S. Kettmann, *Phys. Rev. B* **84**, 075453 (2011).
- [289] D. H. Hernando, F. Guinea, and A. Brataas, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 146801 (2009).
- [290] H. Ochoa, A. H. Castro Neto, and F. Guinea, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 206808 (2012).
- [291] P. Zhang and M. W. Wu, *New J. Phys.* **14**, 033015 (2012).
- [292] Y. Zhou, T. Yu, and M. W. Wu, arXiv:1303.4944.
- [293] M. M. Glazov and E. L. Ivchenko, *JETP Lett.* **99**, 1279 (2004).

- 
- [294] X. Z. Ruan, H. H. Luo, Yang Ji, Z. Y. Xu, and V. Umansky, *Phys. Rev. B* **77**, 193307 (2008).
- [295] R. T. Harley, *Spin Physics in Semiconductors* (Springer, Berlin, 2008), Chap. 2, pp. 29–52. See Ref. [10].
- [296] W. J. H. Leyland, R. T. Harley, M. Henini, A. J. Shields, I. Farrer, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. B* **76**, 195305 (2007).
- [297] 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).
- [298] W. J. H. Leyland, G. H. John, R. T. Harley, M. M. Glazov, E. L. Ivchenko, D. A. Ritchie, I. Farrer, A. J. Shields, and M. Henini, *Phys. Rev. B* **75**, 165309 (2007).
- [299] W. J. H. Leyland, R. T. Harley, M. Henini, A. J. Shields, I. Farrer, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. B* **77**, 205321 (2008).
- [300] J. H. Jiang and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **79**, 125206 (2009).
- [301] P. Zhang and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **80**, 155311 (2009).
- [302] H. C. Schneider M. Krauß, R. Bratschitsch, Z. Chen, and S. T. Cundiff, *Phys. Rev. B* **81**, 035213 (2010).
- [303] K. Shen, *Chin. Phys. Lett.* **26**, 067201 (2009).
- [304] H. Ma, Z. Jin, G. Ma, W. Liu, and S. H. Tang, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 241112 (2009).
- [305] J. H. Jiang and M. W. Wu, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 136101 (2010).
- [306] B. Y. Sun, P. Zhang, and M. W. Wu, *J. Appl. Phys.* **108**, 093709 (2010).
- [307] M. Q. Weng and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **68**, 075312 (2003).
- [308] D. Stich, J. Zhou, T. Korn, R. Schulz, D. Schuh, W. Wegscheider, M. W. Wu, and C. Schüller, *Phys. Rev. B* **76**, 205301 (2007).
- [309] D. Stich, J. Zhou, T. Korn, R. Schulz, D. Schuh, W. Wegscheider, M. W. Wu, and C. Schüller, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 176401 (2007).
- [310] D. Klauser, W. A. Coish, and Daniel Loss, *Phys. Rev. B* **78**, 205301 (2008).
- [311] T. Korn, D. Stich, R. Schulz, D. Schuh, W. Wegscheider, and C. Schüller, *Adv. Solid State Phys.* **48**, 143 (2009).
- [312] F. Zhang, H. Z. Zheng, Y. Ji, J. Liu, and G. R. Li, *Europhys. Lett.* **83**, 47006 (6pp) (2008).
- [313] M. Z. Maialle, E. A. de Andrada e Silva, and L. J. Sham, *Phys. Rev. B* **47**, 15776 (1993).
- [314] H. Tong and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **83**, 235323 (2011).
- [315] A. H. C. Neto and F. Guinea, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 026804 (2009).
- [316] S. Abdelouahed, A. Ernst, J. Henk, I. V. Maznichenko, and I. Mertig, *Phys. Rev. B* **82**, 125424 (2010).
- [317] A. Varykhalov, J. S. Barriga, A. M. Shikin, C. Biswas, E. Vescovo, A. Rybkin, D. Marchenko, and O. Rader, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 157601 (2008).
- [318] Y. S. Dedkov, M. Fonin, U. Rüdiger, and C. Laubschat, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 107602 (2008).
- [319] J. S. Jeong, J. Shin, and H. W. Lee, *Phys. Rev. B* **84**, 195457 (2011).
- [320] M. M. Glazov and V. D. Kulakovskii, *Phys. Rev. B* **79**, 195305 (2009).

- 
- 
- [321] M. M. Glazov, M. A. Semina, and E. Ya. Sherman, Phys. Rev. B **81**, 115332 (2010).
- [322] Y. Zhou, J. H. Jiang, and M. W. Wu, New J. Phys. **11**, 113039 (2009).
- [323] K. L. Litvinenko, M. A. Leontiadou, Juerong Li, S. K. Clowes, M. T. Emeny, T. Ashley, C. R. Pidgeon, L. F. Cohen, and B. N. Murdin, Appl. Phys. Lett. **96**, 111107 (2010).
- [324] J. H. Jiang, Y. Zhou, T. Korn, C. Schüller, and M. W. Wu, Phys. Rev. B **79**, 155201 (2009).
- [325] K. Shen and M. W. Wu, Phys. Rev. B **82**, 115205 (2010).
- [326] L. Wang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **85**, 235308 (2012).
- [327] Y. Zhou and M. W. Wu, Solid State Commun. **149**, 2078 (2009).
- [328] L. E. Golub and E. L. Ivchenko, Phys. Rev. B **69**, 115333 (2004).
- [329] B. A. Glavin and K. W. Kim, Phys. Rev. B **71**, 035321 (2005).
- [330] Z. G. Yu and M. E. Flatté, Phys. Rev. B **66**, 201202 (2002).
- [331] E. I. Rashba, Eur. Phys. J. B **29**, 513 (2002).
- [332] P. Zhang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **79**, 075303 (2009).
- [333] Roland Winkler, *Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Springer-Verlag, 2003).
- [334] Per-Olov Löwdin, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951).
- [335] J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [336] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- [337] G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (John Wiley, 1974).
- [338] P. Pfeffer and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **41**, 1561 (1990).
- [339] P. Pfeffer and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **53**, 12813 (1996).
- [340] J.-M. Jancu, R. Scholz, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, Phys. Rev. B **72**, 193201 (2005).
- [341] Paulo V. Santos, M. Willatzen, M. Cardona, and A. Cantarero, Phys. Rev. B **51**, 5121 (1995).
- [342] J. Y. Fu, M. Q. Weng, and M. W. Wu, Physica E **40**, 2890 (2008).
- [343] Jun-Wei Luo, Gabriel Bester, and Alex Zunger, Phys. Rev. Lett. **102**, 056405 (2009).
- [344] Athanasios N. Chantis, Mark van Schilfgaarde, and Takao Kotani, Phys. Rev. Lett. **96**, 086405 (2006).
- [345] A. G. Aronov, G. E. Pikus, and A. N. Titkov, Zhe. Eksp. Teor. Fiz. **84**, 1170 (1983).
- [346] N. E. Christensen and M. Cardona, Solid State Commun. **51**, 491 (1984).
- [347] P. D. Dresselhaus, C. M. A. Papavassiliou, R. G. Wheeler, and R. N. Sacks, Phys. Rev. Lett. **68**, 106 (1992).
- [348] D. Richards, B. Jusserand, H. Peric, and B. Etienne, Phys. Rev. B **47**, 16028 (1993).
- [349] Bernard Jusserand, David Richards, Guy Allan, Catherine Priester, and Bernard Etienne, Phys. Rev. B **51**, 4707 (1995).
- [350] W. Knap, C. Skierbiszewski, A. Zduniak, E. Litwin-Staszewska, D. Bertho, F. Kobbi, J. L. Robert, G. E. Pikus, F. G. Pikus, S. V. Iordanskii, V. Mosser, K. Zekentes, and Yu. B.

- Lyanda-Geller, Phys. Rev. B **53**, 3912 (1996).
- [351] J. B. Miller, D. M. Zumbühl, C. M. Marcus, Y. B. Lyanda-Geller, D. Goldhaber-Gordon, K. Campman, and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **90**, 076807 (2003).
- [352] Jacob J. Krich and Bertrand I. Halperin, Phys. Rev. Lett. **98**, 226802 (2007).
- [353] K. Shen, J. Y. Fu, and M. W. Wu, Solid State Commun. **151**, 1924 (2011).
- [354] T. Low, M. F. Li, Y. C. Yeo, W. J. Fan, S. T. Ng, and D. L. Kwong, J. Appl. Phys. **98**, 024504 (2005).
- [355] F. Schäffler, Semicond. Sci. Technol. **12**, 1515 (1997).
- [356] M. V. Fischetti, Z. Ren, P. M. Solomon, M. Yang, and K. Rim, J. Appl. Phys. **94**, 1079 (2003).
- [357] C. Y. P. Chao and S. L. Chuang, Phys. Rev. B **46**, 4110 (1992).
- [358] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2004).
- [359] W. Choi, I. Lahiri, R. Seelaboyina, and Y. S. Kang, Crit. Rev. Solid State Mater. Sci. **35**, 52 (2010).
- [360] Z. H. Ni, Y. Y. Wang, T. Yu, and Z. X. Shen, Nano Research **1**, 273 (2008).
- [361] P. Avouris, Nano Lett. **10**, 4285 (2010).
- [362] F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan, and A. C. Ferrari, Nat. Photonics **4**, 611 (2010).
- [363] N. Tombros, C. Józsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, Nature **448**, 571 (2007).
- [364] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, Rev. Mod. Phys. **83**, 407 (2011).
- [365] D. R. Cooper, B. D'Anjou, N. Ghattamaneni, B. Harack, M. Hilke, A. Horth, N. Majlis, M. Massicotte, L. Vandsburger, E. Whiteway, and V. Yu, ISRN Cond. Mat. Phys. **2012**, 501686 (2012).
- [366] F. Wang, Y. Zhang, C. Tian, C. Girit, A. Zettl, M. Crommie, and Y. Ron Shen, Science **320**, 206 (2008).
- [367] D. S. L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler, and T. Chakraborty, Adv. Phys. **59**, 261 (2010).
- [368] M. Shiraishi and T. Ikoma, Physica E **43**, 1295 (2011).
- [369] M. Acik and Y. J. Chabal, Jpn. J. Appl. Phys. **50**, 070101 (2011).
- [370] E. H. Hang, S. Adam, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **98**, 186806 (2007).
- [371] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, Nature **438**, 197 (2005).
- [372] K. I. Bolotin, K.J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, and P. Kim H. L. Stormer, Sol. State Commun. **146**, 351 (2008).
- [373] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, D. C. Elias, J. A. Jaszczak, and A. K. Geim, Phys. Rev. Lett. **100**, 016602 (2008).
- [374] X. Du, I. Skachko, A. Barker, and E. Y. Andrei, Nat. Nanotechnol. **3**, 491 (2008).
- [375] J. Fischer, B. Trauzettel, and D. Loss, Phys. Rev. B **80**, 155401 (2009).
- [376] D. H. Hernando, F. Guinea, and A. Brataas, Phys. Rev. B **74**, 155426 (2006).

- 
- 
- [377] H. Min, J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, B. R. Sahu, L. Kleinman, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **74**, 165310 (2006).
- [378] M. Gmitra, S. Konschuh, C. Ertler, C. A. Draxl, and J. Fabian, Phys. Rev. B **80**, 235431 (2009).
- [379] J. C. Slater and G. F. Koster, Phys. Rev. **94**, 1498 (1954).
- [380] P. R. Wallace, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
- [381] Yugui Yao, Fei Ye, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, and Zhong Fang, Phys. Rev. B **75**, 041401 (2007).
- [382] Sergej Konschuh, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian, Phys. Rev. B **82**, 245412 (2010).
- [383] Jayakumar Balakrishnan, Gavin Kok Wai Koon, Manu Jaiswal, A. H. Castro Neto, and Barbaros Özyilmaz, Nat. Phys. **9**, 284 (2013).
- [384] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).
- [385] Andreas Roth, Christoph Brüne, Hartmut Buhmann, Laurens W Molenkamp, Joseph Maciejko, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang, Science **325**, 294 (2009).
- [386] J. E. Moore and L. Balents, Phys. Rev. B **75**, 121306 (2007).
- [387] Rahul Roy, Phys. Rev. B **79**, 195322 (2009).
- [388] Joel Moore, Nat. Phys. **5**, 378 (2009).
- [389] Y. S. Hor, A. Richardella, P. Roushan, Y. Xia, J. G. Checkelsky, A. Yazdani, M. Z. Hasan, N. P. Ong, and R. J. Cava, Phys. Rev. B **79**, 195208 (2009).
- [390] Z. H. Pan, E. Vescovo, A. V. Fedorov, D. Gardner, Y. S. Lee, S. Chu, G. D. Gu, and T. Valla, Phys. Rev. Lett. **106**, 257004 (2011).
- [391] X. L. Qi, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
- [392] Liang Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B **76**, 045302 (2007).
- [393] Rahul Roy, Phys. Rev. B **79**, 195321 (2009).
- [394] Shuichi Murakami, Satoshi Iso, Yshai Avishai, Masaru Onoda, and Naoto Nagaosa, Phys. Rev. B **76**, 205304 (2007).
- [395] Anders Ström, Henrik Johannesson, and G. I. Japaridze, Phys. Rev. Lett. **104**, 256804 (2010).
- [396] Bin Zhou, Hai-Zhou Lu, Rui-Lin Chu, Shun-Qing Shen, and Qian Niu, Phys. Rev. Lett. **101**, 246807 (2008).
- [397] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995).
- [398] C. X. Liu, X. L. Qi, H. J. Zhang, X. Dai, Z. Fang, and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **82**, 045122 (2010).
- [399] L. Fu, Phys. Rev. Lett. **103**, 266801 (2009).
- [400] Hai-Zhou Lu, Wen-Yu Shan, Wang Yao, Qian Niu, and Shun-Qing Shen, Phys. Rev. B **81**, 115407 (2010).
- [401] H. R. Trebin, U. Rössler, and R. Ranvaud, Phys. Rev. B **20**, 686 (1979).
- [402] Fan Zhang, C. L. Kane, and E. J. Mele, Phys. Rev. B **86**, 081303 (2012).
- [403] W Eerenstein, N D Mathur, and J F Scott, Nature **442**, 759 (2006).

- 
- [404] T. Kimura, T. Goto, H. Shintani, K. Ishizaka, T. Arima, and Y. Tokura, *Nature* **426**, 55 (2003).
- [405] J. Wang, J. B. Neaton, H. Zheng, V. Nagarajan, S. B. Ogale, B. Liu, D. Viehland, V. Vaithyanathan, D. G. Schlom, U. V. Waghmare, N. A. Spaldin, K. M. Rabe, M. Wuttig, and R. Ramesh, *Science* **299**, 1719 (2003).
- [406] K. F. Wang, J.-M. Liu, and Z. F. Ren, *Adv. Phys.* **58**, 321 (2009).
- [407] Daniel Khomskii, *Physics* **2**, 20 (2009).
- [408] Sang-Wook Cheong and Maxim Mostovoy, *Nat. Mater.* **6**, 13 (2007).
- [409] R. Ramesh and Nicola A. Spaldin, *Nat. Mater.* **6**, 21 (2007).
- [410] Y. Tokura and S. Seki, *Adv. Mater.* **22**, 1554 (2010).
- [411] S. Picozzi and C. Ederer, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 303201 (2009).
- [412] A. M. Shuvaev, A. A. Mukhin, and A. Pimenov, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 113201 (2011).
- [413] N. A. Spaldin, M. Fiebig, and M. Mostovoy, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 434203 (2008).
- [414] C. W. Nan, M. I. Bichurin, S. X. Dong, D. Viehland, and G. Srinivasan, *J. Appl. Phys.* **103**, 031101 (2008).
- [415] T. Kimura, *Annu. Rev. Mater. Res.* **37**, 387 (2007).
- [416] Shuai Dong and Jun-Ming Liu, *Mod. Phys. Lett. B* **26**, 1230004 (2012).
- [417] Dmitry V. Efremov, Jeroen van den Brink, and Daniel I. Khomskii, *Nat. Mater.* **3**, 853 (2004).
- [418] Bas B. Van Aken, Thomas T. M. Palstra, Alessio Filippetti, and Nicola A. Spaldin, *Nat. Mater.* **3**, 164 (2004).
- [419] Craig J. Fennie and Karin M. Rabe, *Phys. Rev. B* **72**, 100103 (2005).
- [420] Y. J. Choi, H. T. Yi, S. Lee, Q. Huang, V. Kiryukhin, and S.-W. Cheong, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 047601 (2008).
- [421] Masahito Mochizuki and Nobuo Furukawa, *Phys. Rev. B* **80**, 1 (2009).
- [422] Y. Yamasaki, H. Sagayama, T. Goto, M. Matsuura, K. Hirota, T. Arima, and Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 147204 (2007).
- [423] M. Kenzelmann, A. B. Harris, S. Jonas, C. Broholm, J. Schefer, S. B. Kim, C. L. Zhang, S. W. Cheong, O. P. Vajk, and J. W. Lynn, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 087206 (2005).
- [424] T. Arima, A. Tokunaga, T. Goto, H. Kimura, Y. Noda, and Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 097202 (2007).
- [425] A. Malashevich and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 037210 (2008).
- [426] C. Jia and J. Berakdar, *Phys. Rev. B* **80**, 014432 (2009).
- [427] C. Jia and J. Berakdar, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 012105 (2009).
- [428] S. Seki, Y. Yamasaki, M. Soda, M. Matsuura, K. Hirota, and Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 127201 (2008).
- [429] T. Kimura, S. Ishihara, H. Shintani, T. Arima, K. T. Takahashi, K. Ishizaka, and Y. Tokura, *Phys. Rev. B* **68**, 060403 (2003).
- [430] I. A. Sergienko and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **73**, 094434 (2006).



- 
- [431] Shuai Dong, Rong Yu, Seiji Yunoki, J.-M. Liu, and Elbio Dagotto, *Phys. Rev. B* **78**, 155121 (2008).
- [432] I. Dzyaloshinsky, *J. Phys. Chem. Solids* **4**, 241 (1958).
- [433] T. Moriya, *Phys. Rev.* **120**, 91 (1960).
- [434] Hosho Katsura, Naoto Nagaosa, and Alexander V. Balatsky, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 057205 (2005).
- [435] Maxim Mostovoy, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 067601 (2006).
- [436] H. C. Walker, F. Fabrizi, L. Paolasini, F. de Bergevin, J. Herrero-Martin, A. T. Boothroyd, D. Prabhakaran, and D. F. McMorrow, *Science* **333**, 1273 (2011).
- [437] M. Gajek, M. Bibes, S. Fusil, K. Bouzehouane, J. Fontcuberta, A. Barthélémy, and A. Fert, *Nat. Mater.* **6**, 296 (2007).
- [438] Ying-Hao Chu, Lane W Martin, Mikel B Holcomb, Martin Gajek, Shu-Jen Han, Qing He, Nina Balke, Chan-Ho Yang, Donkoun Lee, Wei Hu, Qian Zhan, Pei-Ling Yang, Arantxa Fraile-Rodríguez, Andreas Scholl, Shan X Wang, and R Ramesh, *Nat. Mater.* **7**, 478 (2008).
- [439] A. Ohtomo and H. Y. Hwang, *Nature* **427**, 423 (2004).
- [440] A. Ohtomo and H. Y. Hwang, *Nature* **441**, 120 (2006).
- [441] S. Thiel, G. Hammerl, A. Schmehl, C. W. Schnerder, and J. Mannhart, *Science* **313**, 1942 (2006).
- [442] A. Ohtomo, D. A. Muller, J. L. Grazul, and H. Y. Hwang, *Nature* **419**, 378 (2002).
- [443] A. Brinkman, M. Huijben, M. van Zalk, J. Huijben, U. Zeitler, J. C. Maan, G. Rijnders, W. G. van der Wiel, D. H. A. Blank, and H. Hilgenkamp, *Nat. Mater.* **6**, 493 (2007).
- [444] A. Kalabukhov, R. Gunnarsson, J. Börjesson, E. Olsson, T. Claeson, and D. Winkler, *Phys. Rev. B* **75**, 121404(R) (2007).
- [445] M. B. Shalom, M. Sachs, D. Rakhmilevitch, A. Palevski, and Y. Dagan, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 126802 (2010).
- [446] A. D. Caviglia, M. Gabay, S. Gariglio, N. Reyren, C. Cancellieri, and J.-M. Triscone, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 126803 (2010).
- [447] F. Loder, A. P. Kampf, and T. Kopp, arXiv:1206.1816.
- [448] Zhicheng Zhong, Anna Tóth, and Karsten Held, *Phys. Rev. B* **87**, 161102 (2013).
- [449] A. C. Ferrari, J. C. Meyer, V. Scardaci, C. Casiraghi, M. Lazzeri, F. Mauri, S. Piscanec, D. Jiang, K. S. Novoselov, S. Roth, and A. K. Geim, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 187401 (2006).
- [450] P. Zhang and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **84**, 045304 (2011).
- [451] S. Ryu, L. Liu, S. Berciaud, Y. J. Yu, H. Liu, P. Kim, G. W. Flynn, and L. E. Brus, *Nano Lett.* **10**, 4944 (2010).
- [452] D. Marchenko, A. Varykhalov, M. R. Scholz, G. Bihlmayer, E. I. Rashba, A. Rybkin, A. M. Shikin, and O. Rader, *Nat. Commun.* **3**, 1232 (2012).
- [453] D. Marchenko, J. Sánchez-Barriga, M. R. Scholz, O. Rader, and A. Varykhalov, *Phys. Rev. B* **87**, 115426 (2013).
- [454] W. Han, K. M. McCreary, K. Pi, W. H. Wang, Y. Li, H. Wen, J. R. Chen, and R. K. Kawakami, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 369 (2012).

- [455] Wei Han, Jen-Ru Chen, Deqi Wang, Kathleen M. McCreary, Hua Wen, Adrian G. Swartz, Jing Shi, and Roland K. Kawakami, *Nano Lett.* **12**, 3443 (2012).
- [456] Adrian G. Swartz, Jen-Ru Chen, Kathleen M. McCreary, Patrick M. Odenthal, Wei Han, and Roland K. Kawakami, *Phys. Rev. B* **87**, 075455 (2013).
- [457] T. Maassen, F. K. Dejene, M. H. D. Guimarães, C. Józsa, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **83**, 115410 (2011).
- [458] Yuanbo Zhang, Tsung-Ta Tang, Caglar Girit, Zhao Hao, Michael C. Martin, Alex Zettl, Michael F. Crommie, Y. Ron Shen, and Feng Wang, *Nature* **459**, 820 (2009).
- [459] E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov, N. M. R. Peres, J. M. B. Lopes dos Santos, J. Nilsson, F. Guinea, A. K. Geim, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216802 (2007).
- [460] Wei Han, K. Pi, K. M. McCreary, Yan Li, Jared J. I. Wong, A. G. Swartz, and R. K. Kawakami, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 167202 (2010).
- [461] C. Józsa, M. Popinciuc, N. Tombros, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **79**, 081402 (2009).
- [462] Chi Zhang, Ying Wang, Baolei Wu, and Yihong Wu, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 022406 (2012).
- [463] A. Avsar, T. Y. Yang, S. Bae, J. Balakrishnan, F. Volmer, M. Jaiswal, Z. Yi, S. R. Ali, G. Güntherodt, B. H. Hong, B. Beschoten, and B. Özyilmaz, *Nano Lett.* **11**, 2363 (2011).
- [464] Kathleen M. McCreary, Adrian G. Swartz, Wei Han, Jaroslav Fabian, and Roland K. Kawakami, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 186604 (2012).
- [465] M. Wojtaszek, I. J. Vera-Marun, T. Maassen, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **87**, 081402 (2013).
- [466] M. B. Lundeberg, R. Yang, J. Renard, and J. A. Folk, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 156601 (2013).
- [467] F. V. Tikhonenko, D. W. Horsell, R. V. Gorbachev, and A. K. Savchenko, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 056802 (2008).
- [468] I. L. Aleiner and Ya. M. Blanter, *Phys. Rev. B* **65**, 115317 (2002).
- [469] S. P. Dash, S. Sharma, J. C. Le Breton, J. Peiro, H. Jaffrés, J.-M. George, A. Lemaitre, and R. Jansen, *Phys. Rev. B* **84**, 054410 (2011).
- [470] Marcos H. D. Guimarães, A. Veligura, P. J. Zomer, T. Maassen, I. J. Vera-Marun, N. Tombros, and B. J. van Wees, *Nano Lett.* **12**, 3512 (2012).
- [471] Bruno Dlubak, Marie-blandine Martin, Cyrille Deranlot, Bernard Servet, Stéphane Xavier, Richard Mattana, Mike Sprinkle, Claire Berger, Walt A De Heer, Frédéric Petroff, Abdelmadjid Anane, Pierre Seneor, and Albert Fert, *Nat. Phys.* **8**, 557 (2012).
- [472] Thomas Maassen, J Jasper van den Berg, Natasja Ijbema, Felix Fromm, Thomas Seyller, Rositza Yakimova, and Bart J van Wees, *Nano Lett.* **12**, 1498 (2012).
- [473] P. J. Zomer, M. H. D. Guimarães, N. Tombros, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **86**, 161416 (2012).
- [474] O. Rader, A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, D. Marchenko, A. Rybkin, and A. M. Shikin, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 057602 (2009).
- [475] D. Huertas-Hernandoa, F. Guinea, and A. Brataas, *Eur. Phys. J. Special Topics* **148**, 177

- (2007).
- [476] Dongwei Ma, Zhongyao Li, and Zhongqin Yang, *Carbon* **50**, 297 (2012).
- [477] A. Dyrdał and J. Barnaś, *Phys. Rev. B* **86**, 161401 (2012).
- [478] T.-Y. Yang, J. Balakrishnan, F. Volmer, A. Avsar, M. Jaiswal, J. Samm, S. R. Ali, A. Pachoud, M. Zeng, M. Popinciuc, G. Güntherodt, B. Beschoten, and B. Özyilmaz, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 047206 (2011).
- [479] I. Neumann, J. Van de Vondel, G. Bridoux, M. V. Costache, F. Alzina, C. M. S. Torres, and S. O. Valenzuela, *Small* **9**, 156 (2013).
- [480] S. Kunschuh, M. Gmitra, D. Kochan, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **85**, 115423 (2012).
- [481] F. Guinea, *New J. Phys.* **12**, 083063 (2010).
- [482] M. Diez and G. Burkard, *Phys. Rev. B* **85**, 195412 (2012).
- [483] L. Wang and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **87**, 205416 (2013).
- [484] Joseph Abel, Akitomo Matsubayashi, John J. Garramone, and Vincent P. LaBella, *J. Vac. Sci. Technol. B* **30**, 03D115 (2012).
- [485] H. Goto, A. Kanda, T. Sato, S. Tanaka, Y. Ootuka, S. Odaka, H. Miyazaki, K. Tsukagoshi, and Y. Aoyagi, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 212110 (2008).
- [486] Andor Kormányos and Guido Burkard, *Phys. Rev. B* **87**, 045419 (2013).
- [487] P. Zhang and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **87**, 085319 (2013).
- [488] J. H. Jiang, M. W. Wu, and Y. Zhou, *Phys. Rev. B* **78**, 125309 (2008).
- [489] Y. Zhou and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **83**, 245436 (2011).
- [490] P. Zhang, J. Zhou, and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **77**, 235323 (2008).
- [491] H. Tong and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **85**, 075203 (2012).
- [492] B. Y. Sun, Y. Zhou, and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **85**, 125413 (2012).
- [493] J. L. Cheng, M. W. Wu, and I. C. da Cunha Lima, *Phys. Rev. B* **75**, 205328 (2007).
- [494] N. S. Averkiev, L. E. Golub, A. S. Gurevich, V. P. Evtikhiev, V. P. Kochereshko, A. V. Platonov, A. S. Shkolnik, and Yu. P. Efimov, *Phys. Rev. B* **74**, 033305 (2006).
- [495] M. Studer, S. Schön, K. Ensslin, and G. Salis, *Phys. Rev. B* **79**, 045302 (2009).
- [496] 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).
- [497] B. L. Liu, H. M. Zhao, J. Wang, L. S. Liu, W. X. Wang, and D. M. Chen H. J. Zhu, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 112111 (2007).
- [498] A. V. Larionov and L. E. Golub, *Phys. Rev. B* **78**, 033302 (2008).
- [499] N. S. Averkiev, L. E. Golub, and M. Willander, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, R271 (2002).
- [500] J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 146801 (2003).
- [501] B. A. Bernevig, J. Orenstein, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 236601 (2006).
- [502] M. W. Wu and M. Kuwata-Gonokami, *Solid State Commun.* **121**, 509 (2002).
- [503] S. Döhrmann, D. Hägele, J. Rudolph, M. Bichler, D. Schuh, and M. Oestreich, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 147405 (2004).
- [504] X. Cartoixà, D. Z.-Y. Ting, and Y.-C. Chang, *Phys. Rev. B* **71**, 045313 (2005).

- [505] Ramunas Aleksiejunas, Arunas Kadys, Kestutis Jarasiunas, Florian Saas, Uwe Griebner, and Jens W. Tomm, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 102105 (2007).
- [506] M. Q. Weng, M. W. Wu, and L. Jiang, *Phys. Rev. B* **69**, 245320 (2004).
- [507] M. Q. Weng and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **70**, 195318 (2004).
- [508] A. W. Holleitner, V. Sih, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *New J. Phys.* **9**, 342 (2007).
- [509] P. Zhang and M. W. Wu, *Europhys. Lett.* **92**, 47009 (2010).
- [510] A. Tackeuchi, S. Muto, T. Inata, and T. Fujii, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 2213 (1990).
- [511] A. Miller, P. Riblet, M. Mazilu, S. White, T. M. Holden, A. R. Cameron, and P. Perozzo, *J. Appl. Phys.* **86**, 3734 (1999).
- [512] A. Tackeuchi, T. Kuroda, S. Muto, Y. Nishikawa, and O. Wada, *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 4680 (1999).
- [513] D. J. Hilton and C. L. Tang, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 146601 (2002).
- [514] S. Pfalz, R. Winkler, T. Nowitzki, D. Reuter, A. D. Wieck, D. Hägele, and M. Oestreich, *Phys. Rev. B* **71**, 165305 (2005).
- [515] T. S. Lai, L. N. Liu, Q. Shou, L. Lei, and W. Z. Lin, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 4040 (2004).
- [516] M. W. Wu and C. Z. Ning, *Phys. Stat. Sol. (b)* **222**, 523 (2000).
- [517] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *Zh. Éksp. Teor. Fiz.* **39**, 66 (1984).
- [518] J. Nitta, F. E. Meijer, and H. Takayanagi, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 695 (1999).
- [519] Y. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Nature* **427**, 50 (2004).
- [520] L. Jiang and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **72**, 033311 (2005).
- [521] S. A. Crooker and D. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 236601 (2005).
- [522] M. Beck, C. Metzner, S. Malzer, and G. H. Dohler, *Europhys. Lett.* **75**, 597 (2006).
- [523] J. B. Gunn, *Solid State Commun.* **1**, 88 (1963).
- [524] X. L. Lei, D. Y. Xing, M. Liu, C. S. Ting, and J. L. Birman, *Phys. Rev. B* **36**, 9134 (1987).
- [525] D. Y. Xing, M. Liu, and C. S. Ting, *Phys. Rev. B* **37**, 10283 (1987).
- [526] W. Magnus, C. Sala, and K. D. Meyer, *Phys. Rev. B* **43**, 9045 (1990).
- [527] J. L. Educato, J. P. Leburton, J. Wang, and D. W. Bailey, *Phys. Rev. B* **44**, 8365 (1991).
- [528] J. Sjakste, V. Tyuterev, and N. Vast, *Appl. Phys. A* **86**, 301 (2007).
- [529] S. Saikin, M. Shen, and M. C. Cheng, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 1535 (2006).
- [530] Y. Qi, Z. G. Yu, and M. E. Flatté, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 026602 (2006).
- [531] N. Chand, T. Henderson, J. Klem, W. T. Masselink, and R. Fischer, *Phys. Rev. B* **30**, 4481 (1984).
- [532] J. Pozela and A. Reklaitis, *Solid State Commun.* **27**, 1073 (1978).
- [533] *Semiconductors*, edited by O. Madelung (Springer, 1987).
- [534] K. Shen, M. Q. Weng, and M. W. Wu, *J. Appl. Phys.* **104**, 063719 (2008).
- [535] E. L. Ivchenko and G. E. Pikus, *Superlattices and Other Heterostructures: Symmetry and Optical Phenomena* (Springer, Berlin, 1997).
- [536] A. G. Aronov, G. E. Pikus, and A. N. Titkov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **84**, 1170 (1983).
- [537] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum, New York, 1981).

- 
- [538] M. Liu, D. Y. Xing, C. S. Ting, and W. T. Xu, Phys. Rev. B **37**, 2997 (1988).
- [539] J. L. Birman and M. Lax R. Loudon, Phys. Rev. **145**, 620 (1966).
- [540] D. C. Herbert, J. Phys. C: Solid State Phys. **6**, 2788 (1973).
- [541] W. Fawcett and D. C. Herbert, J. Phys. C: Solid State Phys. **7**, 1641 (1974).
- [542] R. Mickevičius and A. Reklaitis, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 7883 (1990).
- [543] A. P. Dmitriev, V. Y. Kachorovskii, M. S. Shur, and M. Stroschio, Solid State Commun. **113**, 565 (2000).
- [544] F. M. Bufler, A. Schenk, and W. Fichtner, J. Appl. Phys. **90**, 2626 (2001).
- [545] M. M. Glazov and E. L. Ivchenko, Pis'ma Zh. Éksp. Teor. Fiz. **75**, 476 (2002).
- [546] G. F. Giuliani and G. Vignale, *Quantum Theory of the Electron Liquid* (Cambridge University Press, 2005).
- [547] K. Tomizawa, *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices* (Artech House, 1993).
- [548] C. Tahan and R. Joynt, Phys. Rev. B **71**, 075315 (2005).
- [549] Z. Wilamowski, W. Jantsch, H. Malissa, and U. Rössler, Phys. Rev. B **66**, 195315 (2002).
- [550] W. Jantsch, Z. Wilamowski, N. Sandersfeld, M. Mühlberger, and F. Schäffler, Physica E **13**, 504 (2002).
- [551] M. Ramonas, A. Matulionis, and L. F. Eastman, Semicond. Sci. Technol. **22**, 875 (2007).
- [552] R. Mickevičius, V. Mitin, G. Paulavičius, V. Kochelap, M. A. Stroschio, and G. J. Lafrate, J. Appl. Phys. **80**, 5145 (1996).
- [553] W. Cai, M. C. Marchetti, and M. Lax, Phys. Rev. B **37**, 2636 (1988).
- [554] X. L. Lei and N. J. M. Horing, Phys. Rev. B **35**, 6281 (1987).
- [555] W. Cai, M. C. Marchetti, and M. Lax, Phys. Rev. B **34**, 8573 (1986).
- [556] J. C. Vaissiere, J. P. Nougier, L. Varani, P. Houlet, L. Hlou, L. Reggiani, and P. Kocevar, Phys. Rev. B **53**, 9886 (1996).
- [557] J. C. Vaissiere, J. P. Nougier, M. Fadel, L. Hlou, and P. Kocevar, Phys. Rev. B **46**, 13082 (1992).
- [558] G. Paulavičius, V. V. Mitin, and N. A. Bannov, J. Appl. Phys. **82**, 5580 (1997).
- [559] M. W. Wu, N. J. M. Horing, and H. L. Cui, Phys. Rev. B **54**, 5438 (1996).
- [560] F. Vallée and F. Bogani, Phys. Rev. B **43**, 12049 (1991).
- [561] K. Seeger, *Semiconductor Physics* (Springer, 2002).
- [562] B. Y. Sun and M. W. Wu, arXiv:1302.3677.
- [563] C. P. Weber, N. Gedik, J. E. Moore, J. Orenstein, J. Stephens, and D. D. Awschalom, Nature **437**, 1330 (2005).
- [564] M. Shen, S. Saikin, and M. C. Cheng, J. Appl. Phys. **96**, 4319 (2004).
- [565] S. A. Crooker and D. L. Smith, Phys. Rev. Lett. **94**, 236601 (2005).
- [566] M. Q. Weng, M. W. Wu, and H. L. Cui, J. Appl. Phys. **103**, 063714 (2008).
- [567] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices* (Wiley-Interscience, New York, 1981).
- [568] E. Pop, R. W. Dutton, and K. E. Goodson, J. Appl. Phys. **96**, 4998 (2004).
- [569] E. Sonder and D. K. Stevens, Phys. Rev. **110**, 1027 (1958).

- [570] J. L. Cheng and M. W. Wu, *J. Appl. Phys.* **99**, 083704 (2006).
- [571] M. M. Glazov and E. L. Ivchenko, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **126**, 1465 (2004).
- [572] C. H. Lewenkopf, E. R. Mucciolo, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **77**, 081410 (2008).
- [573] S. Adam and S. Das Sarma, *Solid State Commun.* **146**, 356 (2008).
- [574] K. M. McCreary, K. Pi, A. G. Swartz, W. Han, W. Bao, C. N. Lau, F. Guinea, M. I. Katsnelson, and R. K. Kawakami, *Phys. Rev. B* **81**, 115453 (2010).
- [575] E. H. Hwang and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **77**, 115449 (2008).
- [576] M. Lazzeri, S. Piscanec, F. Mauri, A. C. Ferrari, and J. Robertson, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 236802 (2005).
- [577] S. Fratini and F. Guinea, *Phys. Rev. B* **77**, 195415 (2008).
- [578] E. Rossi and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 166803 (2008).
- [579] W. Izumida, K. Sato, and R. Saito, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 074707 (2009).
- [580] J. S. Jeong and H. W. Lee, *Phys. Rev. B* **80**, 075409 (2009).
- [581] Y. G. Semenov, J. M. Zavada, and K. W. Kim, *Phys. Rev. B* **82**, 155449 (2010).
- [582] Y. Zhang, Z. Jiang, J. P. Small, M. S. Purewal, Y. W. Tan, M. Fazlollahi, J. D. Chudow, J. A. Jaszczak, H. L. Stormer, and P. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 136806 (2006).
- [583] I. A. Luk'yanchuk and A. M. Bratkovsky, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 176404 (2008).
- [584] M. R. Ramezani, M. M. Vazifeh, R. Asgari, M. Polini, and A. H. MacDonald, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 214015 (2009).
- [585] Y. W. Tan, Y. Zhang, K. Bolotin, Y. Zhao, S. Adam, E. H. Hwang, S. Das Sarma, H. L. Stormer, and P. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 246803 (2007).
- [586] M. Ziese and M. J. Thornton, *Spin Electronics* (Springer, 2001).
- [587] C. O. Aristizabal, M. S. Fuhrer, N. P. Butch, J. Paglione, and I. Appelbaum, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 023102 (2012).
- [588] P. Schwab, R. Raimondi, and C. Gorini, *Europhys. Lett.* **93**, 67004 (2011).
- [589] D. Culcer, E. H. Hwang, T. D. Stanescu, and S. D. Sarma, *Phys. Rev. B* **82**, 155457 (2010).
- [590] A. A. Burkov and D. G. Hawthorn, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 066802 (2010).
- [591] X. Zhu, L. Santos, R. Sankar, S. Chikara, C. Howard, F. C. Chou, C. Chamon, and M. E. Batanouny, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 186102 (2011).
- [592] E. M. Conwell, *High Field Transport in Semiconductors* (Pergamon, 1972).
- [593] P. Wei, Z. Wang, X. Liu, V. Aji, and J. Shi, *Phys. Rev. B* **85**, 201402 (2012).
- [594] O. G. Balev, F. T. Vasko, and V. Ryzhii, *Phys. Rev. B* **79**, 165432 (2009).
- [595] W. Richter, H. Köhler, and C. R. Becker, *Phys. Status Solidi B* **84**, 619 (1977).
- [596] N. P. Butch, K. Kirshenbaum, P. Syers, A. B. Sushkov, G. S. Jenkins, H. D. Drew, and J. Paglione, *Phys. Rev. B* **81**, 241301 (2010).
- [597] E. H. Hwang and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **75**, 205418 (2007).
- [598] T. Winzer, A. Knorr, and E. Malic, *Nano Lett.* **10**, 4839 (2010).
- [599] T. Winzer and E. Malic, *Phys. Rev. B* **85**, 241404 (2012).
- [600] A. B. Kashuba, *Phys. Rev. B* **78**, 085415 (2008).
- [601] C. Jia and J. Berakdar, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 042110 (2011).

- 
- [602] C. Jia and J. Berakdar, Phys. Rev. B **83**, 045309 (2011).
- [603] N. Hur, S. Park, P. A. Sharma, J. S. Ahn, S. Guha, and S. W. Cheong, Nature **429**, 392 (2004).
- [604] N. S. Averkiev and L. E. Golub, Phys. Rev. B **60**, 15582 (1999).

## 本硕博期间发表的论文

1. **P. Zhang** and M. W. Wu, “*Non-Markovian hole spin kinetics in p-type GaAs quantum wells*”, *Phys. Rev. B* **76**, 193312 (2007). (本科毕业论文, 未包含在本论文)
2. **P. Zhang**, J. Zhou, and M. W. Wu, “*Multivalley spin relaxation in the presence of high in-plane electric fields in n-type GaAs quantum wells*”, *Phys. Rev. B* **77**, 235323 (2008). (包含在第 5 章)
3. L. H. Teng, **P. Zhang**, T. S. Lai, and M. W. Wu, “*Density dependence of spin relaxation in GaAs quantum well at room temperature*”, *Europhys. Lett.* **84**, 27006 (2008). (包含在第 5 章)
4. **P. Zhang** and M. W. Wu, “*Spin diffusion in Si/SiGe quantum wells: spin relaxation in the absence of D'yakonov-Perel' relaxation mechanism*”, *Phys. Rev. B* **79**, 075303 (2009). (对应第 6 章)
5. **P. Zhang** and M. W. Wu, “*Hole spin relaxation in (001) strained asymmetric Si/SiGe and Ge/SiGe quantum wells*”, *Phys. Rev. B* **80**, 155311 (2009). (包含在第 5 章)
6. B. Y. Sun, **P. Zhang**, and M. W. Wu, “*Spin relaxation in n-type (111) GaAs quantum wells*”, *J. Appl. Phys.* **108**, 093709 (2010). (未包含在本论文)
7. **P. Zhang** and M. W. Wu, “*Effect of nonequilibrium phonon on hot-electron spin relaxation in n-type GaAs quantum wells*”, *Europhys. Lett.* **92**, 47009 (2010). (包含在第 5 章)
8. B. Y. Sun, **P. Zhang**, and M. W. Wu, “*Voltage controlled spin precession in InAs quantum wells*”, *Semicond. Sci. Technol.* **26**, 075005 (2011). (未包含在本论文)
9. **P. Zhang** and M. W. Wu, “*Electron spin diffusion and transport in graphene*”, *Phys. Rev. B* **84**, 045304 (2011). (对应第 8 章)
10. **P. Zhang** and M. W. Wu, “*Electron spin diffusion at the interface of multi-ferroic oxides*”, *Phys. Rev. B* **84**, 014433 (2011). (对应第 10 章)



11. **P. Zhang** and M. W. Wu, “*Electron spin relaxation in graphene with random Rashba field: Comparison of D’yakonov-Perel’ and Elliot-Yafet-like mechanisms*”, *New J. Phys.* **14**, 033015 (2012). (包含在第 7 章)
12. **P. Zhang**, Y. Zhou, and M. W. Wu, “*Electron spin relaxation in rippled graphene with low mobilities*”, *J. Appl. Phys.* **112**, 073709 (2012). (包含在第 7 章)
13. **P. Zhang** and M. W. Wu, “*Hot-carrier transport and spin relaxation on the surface of topological insulator*”, *Phys. Rev. B* **87**, 085319 (2013). (对应第 9 章)

## 会议报告

1. Oral representation at the 16th National Conference on Physics of Semiconductors, Lanzhou, **CHINA**, September 7-13, 2007. Title: “*Non-Markovian hole spin kinetics in p-type GaAs quantum wells*”. Contributing authors: **P. Zhang** and M. W. Wu.
2. Oral representation at the 13th National Conference on Magnetism, Yichang, **CHINA**, October 31-November 5, 2008. Title: “*Multivalley spin relaxation in the presence of high in-plane electric fields in n-type GaAs quantum wells*”. Contributing authors: **P. Zhang** and M. W. Wu.
3. Posters at the 30th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS 2010), Seoul, **KOREA**, July 25-30, 2010. Title: “*Spin diffusion in Si/SiGe quantum wells: spin relaxation in the absence of D’yakonov-Perel’ relaxation mechanism*”. Contributing authors: **P. Zhang** and M. W. Wu; Title: “*Effect of nonequilibrium phonon on hot-electron spin relaxation in n-type GaAs quantum wells*”. Contributing authors: **P. Zhang** and M. W. Wu.
4. Oral representation at the APS March Meeting, Boston, **USA**, February 27-March 2, 2012. Title: “*Spin diffusion and precession at the multiferroic interface and InAs quantum wells*”. Contributing authors: **P. Zhang** and M. W. Wu.
5. Posters at the 17th National Conference on Condensed Matter Theory and Statistical Physics, Lanzhou, **CHINA**, July 23-26, 2012. Title: “*Electron spin diffusion and transport in graphene*”. Contributing authors: **P. Zhang** and M. W. Wu; Title: “*Electron spin relaxation in graphene with random Rashba field: Comparison of D’yakonov-Perel’ and Elliot-Yafet-like mechanisms*”. Contributing authors: **P. Zhang** and M. W. Wu.

## 致 谢

首先，我要由衷感谢吴老师七年多以来在学习和工作上对我的悉心指导。在这段时期的学习中，我在个人的工作能力和知识储备上有了较大的提高。尤其重要的是，系统而严谨的训练让我从一个大学本科生渐渐地向一个具有一定素养和专业精神的科学研究者的方向成长。这段时期也是人生观和价值观不断完善和成熟的过程。得益于吴老师在人文精神方面的熏陶和教育，我认识到了许多之前没有接触的事物，思考了一些不曾去探究的问题。同时，我还要对吴老师的夫人孙炜老师致以诚挚的谢意。自认识以来，她对我的日常学习和生活给予了很大的关心和帮助。另外，吴老师的母亲陈宝珠老师对我的生活也有关心和帮助，在此一并感谢。

但是，由于思想上的不成熟，在这段时间里，我所获取的远远小于这个环境所能给予的。而且，即使对于自身存在的问题，我也还没有很好地克服。正确地认识每一时刻自己的状况以及周围的环境，却又不局限于眼前，是吴老师给我的教诲之一。对此，我将铭记于心，并努力将其作为自己行为的指导。

我要感谢吴老师组里所有的新旧成员。大家的团结互助、共同营造的良好的学习氛围、以及富有启发性和有效性的讨论都让我受益颇多。感谢翁明其副教授一直以来在科研以及 Linux 系统和集群的维护管理上诸多具有指导性的意见和帮助。感谢程晋罗师兄在工作、Linux 系统管理以及日常生活等方面十分耐心的帮助和有益的交流讨论。感谢蒋建华师兄在工作以及思想上对我的关心与帮助。吕川、周俊以及王元元同学在早期以及殷曰博士最近三年来对我的科研工作也给予了不少帮助，在此表示深深的谢意。我也要感谢孙伯业和周扬在与我合作的工作中所做的贡献表示感谢。感谢沈卡、周扬、王琳、孙伯业、刘哲、于涛、任亚飞、杨飞和徐健刚等组内成员以及我的室友李向军同学，他们在我这么多年的研究生生活中不可或缺。感谢周扬、王琳、孙伯业和于涛拿出宝贵的时间对本论文的部分内容进行阅读并提出有益的修改意见。

最后，感谢我的亲人、老师和朋友们对我的关爱。感谢邓红的关心和帮助。特别要感谢家人对我的养育以及二十多年以来对我的学业的一如既往的支持。

张鹏

二零一三年五月