

中国科学技术大学 博士学位论文



二维系统中自旋动力学以及单层石墨烯中 拓扑超导体的理论研究

作者姓名: 王琳
学科专业: 凝聚态物理
导师姓名: 吴明卫教授
完成时间: 二零一六年七月

University of Science and Technology of China

A dissertation for doctor's degree



Spin Dynamics in Two-Dimensional Systems and Topological Superconductor in Single-Layer Graphene

Author's name : Lin Wang

Speciality : Condensed Matter Physics

Supervisor : Prof. Dr. Ming-Wei Wu

Finished time : July, 2016

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

自旋电子学是以操控固体材料中的自旋自由度为核心的一门多交叉学科，它的目标是制造出实用的自旋电子学器件来取代传统的基于电荷的电子学器件。要实现这个目的，我们很有必要了解各种系统中的自旋动力学行为。在本论文中我们主要研究了二维系统包括半导体量子阱、双层石墨烯以及单层 MoS_2 中的载流子自旋弛豫/自旋扩散。除了自旋动力学外，我们还研究了单层石墨烯中的拓扑超导体和 Majorana 费米子以及硅单量子点和侧向耦合的双量子点中的单三态弛豫。

第 1 章是关于自旋电子学的背景介绍，我们先简单回顾了三类自旋电子学器件的发展，紧接着介绍了时间域的几个主要的自旋弛豫机制包括 D'yakonov-Perel', Elliot-Yafet 和 Bir-Aronov-Pikus 机制，然后总结了新型二维材料单双层石墨烯和单层 MoS_2 中有关自旋弛豫的研究现状，最后简单讨论了空间输运过程中的自旋弛豫机制。

在第 2 章中，我们先介绍了动力学自旋 Bloch 方程，利用该方程可以很好地研究各种系统中的自旋动力学行为，这些系统包括三维的块体材料、受限的量子阱量子线、新型的二维材料比如说单双层石墨烯和单层 MoS_2 以及拓扑绝缘体的表面态等。之后从该方程出发，我们从微观的角度讨论了时间域和空间域的自旋弛豫机制。需要指出的是本论文中所有跟自旋动力学相关的研究都是基于动力学自旋 Bloch 方程的，具体包括第 3 到第 6 章。

我们在第 3 章中研究了 (111) GaAs 量子阱中的载流子自旋弛豫。在 (111) GaAs 量子阱中，重空穴的总的平面内有效磁场（包括了 Dresselhaus 和 Rashba 项的贡献）在整个动量空间可以被非常强烈地压制而轻空穴和电子的只能在某一特殊的动量圈上严格为零。对重空穴来说，我们在自旋弛豫时间的门电压依赖关系中预言了一个非常显著的峰，自旋弛豫时间最长可以达到几百纳秒。但是，对轻空穴和电子而言，在自旋弛豫时间的门电压依赖关系中只能看到一个很不明显的峰。

在第 4 章中，我们研究了双层石墨烯中最低导带电子的 D'yakonov-Perel' 自旋弛豫。我们发现自旋轨道耦合平面外分量的主导项是一个类 Zeeman 项，在两个能谷中的有效磁场大小相等方向相反，这跟弯曲的单层石墨烯中的情况类似。这个类 Zeeman 项跟谷间散射一起可以打开谷间自旋弛豫通道，其中谷间电子-声子散射在高温下可以非常明显地加快平面内自旋弛豫而谷间短程杂质散射对温度不敏感，可以在低温下对平面内自旋弛豫起着非常重要的作用。具体来说，在不考虑短程杂质的时候，我们发现平面内自旋弛豫时间随温度呈现明显的非单调变化，自旋弛豫时间最小可以达到几百皮秒。此外，我们预言在低温下平面内自旋弛豫时间的电子浓度依赖关系中会出现一个峰，这个峰跟半导体中的很不一样。我们还发现平面内自旋弛豫时间在低温下随初始自旋极化

的增大而迅速减小，跟半导体和单层石墨烯中自旋弛豫时间随初始自旋极化的增大而明显变大的行为完全相反。另外，平面外的自旋弛豫时间在高温下比平面内的大两个量级左右，此时平面内外的自旋弛豫表现出非常强的各向异性。我们还将理论模型跟最近实验中测量到的自旋弛豫时间的温度和电子浓度依赖关系做了非常详细的比较。

之后在第 5 章中，我们研究了单层 MoS_2 中由 D'yakonov-Perel' 和 Elliot-Yafet 机制导致的电子自旋弛豫。我们利用 Löwdin 块对角化的方法得到了 K (K') 点附近最低导带的有效哈密顿量。导带的自旋轨道耦合可以引起 D'yakonov-Perel' 机制下的谷内和谷间自旋弛豫。除了 D'yakonov-Perel' 自旋弛豫外，我们还计算了由导带价带间自旋混合导致的 Elliot-Yafet 自旋弛豫，通过比较发现在平面内自旋弛豫中 D'yakonov-Perel' 机制始终占据主导地位。在 D'yakonov-Perel' 机制的框架下，谷内自旋弛豫过程在低温下更重要而谷间过程在高温下成为主导项。当温度介于两者之间的时候，随着电子浓度的变大，主要过程由谷间变到谷内。此外，对于谷间过程而言，我们发现自旋弛豫时间随温度升高、电子浓度增加以及初始自旋极化变大都表现出单调减小的行为。对于谷内过程来说，电子-杂质散射的贡献可以忽略，此时占据主导地位的是电子-电子库仑散射，这跟半导体和石墨烯中的情况很不一样。另外，我们发现平面外自旋弛豫时间随磁场的增大而减小。在上面的计算中，导带和价带的自旋轨道耦合提供的有效磁场在 K (K') 处是同向的。但是最近的一些理论研究表明在 K (K') 处导带的自旋轨道耦合的有效磁场跟价带的是反向的。我们根据最近的理论工作重新计算了单层 MoS_2 中的自旋弛豫，发现跟上面的结果相比出现了一些新的物理现象。对平面内自旋弛豫而言，当电子浓度较高的时候，总的 D'yakonov-Perel' 自旋弛豫时间随温度呈现非单调变化，这是由谷间自旋弛豫过程导致的。对于平面外自旋弛豫来说，自旋弛豫时间随磁场的增加先减小后变大。

除了时间域的自旋弛豫外，我们还研究了空间域的自旋扩散。在第 6 章中，我们讨论了单层 MoS_2 中的电子自旋扩散，这里没有考虑外加电场和磁场的作用。我们发现电子-杂质散射在平面内自旋扩散的过程中扮演着非常重要的角色，来源于空间域中各向异性的自旋进动频率，这跟第 5 章中讲的单层 MoS_2 中电子-杂质散射在时间域的自旋弛豫中可忽略形成了鲜明的对比。我们通过解析求解动力学自旋 Bloch 方程研究了平面内自旋扩散的谷内和谷间过程，其中谷内（谷间）过程中只考虑了电子-杂质（谷间电子-声子）散射。我们发现谷内自旋扩散过程始终占据主导地位，跟单层 MoS_2 中时间域的自旋弛豫中的情况很不一样，在自旋弛豫中谷间过程可以跟谷内过程相比拟，有的时候甚至可以比谷内过程更重要。对占据主导地位的谷内过程而言，自旋扩散长度随杂质浓度的增加而减小但是随电子浓度的增加而变大。非常有意思的是，在谷内过程中进一步考虑电子-电子库仑散射后，我们发现谷内自旋扩散长度在非简并极限下随电子浓度的变大而减小，跟只有电子-杂质散射的情况完全相反。

在上面的几章中我们讨论了二维系统中的载流子自旋动力学。此外，我们还研究了最近非常热门的拓扑超导体和 Majorana 费米子。在第 7 章中我们先介绍了 Majorana 费米子的历史，然后总结了 Majorana 费米子的研究现状。目前大家认为 Majorana 费米

子最有可能在拓扑超导体中实现，我们具体介绍了几个典型的拓扑超导体包括有效 p 波超导体和基于量子反常霍尔绝缘体的拓扑超导体。文献中报道单层石墨烯在 Rashba 自旋轨道耦合和交换场的共同作用下可以实现量子反常霍尔绝缘体。在第 8 章中，我们利用该量子反常霍尔绝缘体跟传统的 s 波超导体通过近邻耦合在一起来实现二维拓扑超导体。在 Dirac 点附近非常低掺杂甚至零掺杂的时候，该拓扑超导体的 Chern 数可以达到 4，在边界处有四个 Majorana 费米子。更重要的是，我们发现该拓扑超导体的能隙可能比近邻引入的超导配对势强度还大，有的时候甚至可以大一个量级。这个非常独特的性质跟之前被广泛研究的有效 p 波超导体中的情况很不一样，有效 p 波超导体的能隙始终比近邻引入的超导配对势强度小。

最后在第 9 章中，我们研究了硅单量子点和侧向耦合的双量子点中由自旋轨道耦合和电子-声子散射导致的单三态驰豫。我们严格考虑了对电子能谱起着非常重要作用的电子-电子库仑相互作用以及由界面耦合引起的能谷劈裂。我们利用严格对角化的方法得到了体系的能谱，在能谱的磁场、量子点大小或者量子点间距的依赖关系中发现了交叉/反交叉点，在反交叉点附近单态和其中一个三态的能级之间会打开一个小的能隙。通过费米黄金规则计算发现跟这两个态相关的通道的驰豫率在反交叉点附近表现出峰或者谷的行为。需要强调的是，在单量子点中，我们的模型在平行磁场下的结果跟实验测量值吻合得非常的好，由此我们确定了实验中测量的自旋驰豫时间是最低单态的寿命。我们还预言在单三态驰豫率的磁场依赖关系中会出现一个峰。在双量子点中，我们还研究了平面内电场对能谱和跃迁几率的影响。我们发现随着电场的变大，最低四个能级的构型都从 (1,1) 变到 (2,0)。但是这几个能级之间的跃迁几率几乎不随电场变化，这对自旋操控非常有意义，因为在量子比特构型改变的过程中量子态的寿命几乎保持不变。

关键词： 半导体 石墨烯 单层 MoS₂ 自旋驰豫 自旋扩散 多体系统 Majorana 费米子 硅量子点

Abstract

Spintronics is a multidisciplinary field, whose central theme is the active manipulation of spin degree of freedom in solid-state materials. The goal of spintronics is to make useful spintronic devices to take place of the conventional charge-based electronic ones. To achieve this goal, it is essential for us to understand the spin dynamics in various systems. In this dissertation, we mainly investigate the spin relaxation/spin diffusion in semiconductor quantum wells, bilayer graphene and also monolayer MoS₂. In addition to the spin dynamics, we also study the topological superconductor and Majorana fermions in single-layer graphene and singlet-triplet relaxation in silicon single and laterally coupled double quantum dots.

Chapter 1 is an introduction to the background of spintronics. We first briefly review the development of all three kinds of spintronic devices, and then introduce several main spin relaxation mechanisms in time domain including D'yakonov-Perel', Elliot-Yafet and Bir-Aronov-Pikus mechanisms. After this, we review the current status of research on spin relaxation in single-layer graphene, bilayer graphene and also monolayer MoS₂. At last, we briefly discuss the spin relaxation mechanism in spatial domain.

In Chapter 2, we first introduce the kinetic spin Bloch equations, which can be used to fully investigate the spin dynamics in various systems including three-dimensional bulk materials, confined quantum wells and wires, new two-dimensional materials such as single-layer graphene, bilayer graphene and monolayer MoS₂, the surface states of the topological insulators and so on. Then starting from these equations, we discuss the spin relaxation mechanisms in both time and spatial domains from a microscopic viewpoint. It is noted that in this dissertation, all studies relevant to the spin dynamics (Chapter 3-6) are based on the kinetic spin Bloch equations.

We investigate the carrier spin relaxation in (111) GaAs quantum wells in Chapter 3. In (111) GaAs quantum wells, the total in-plane effective magnetic field of the heavy holes, which is contributed by both the Dresselhaus and Rashba terms, can be strongly suppressed in the whole momentum space whereas the ones of light holes and electrons can only be suppressed to zero on a special momentum circle. For the heavy holes, we predict a pronounced peak in the gate-voltage dependence of the heavy-hole spin relaxation time where an extremely long spin relaxation time (up to hundreds of nanoseconds) can be reached. However, for the light holes and electrons, only a mild peak is observed in the

gate-voltage dependence of the spin relaxation time.

In Chapter 4, we study the electron spin relaxation due to the D'yakonov-Perel' mechanism in bilayer graphene. We find that the leading term of the out-of-plane component of the spin-orbit coupling in bilayer graphene shows a Zeeman-like term with opposite effective magnetic fields in two valleys. This Zeeman-like terms opens an intervalley spin relaxation channel in the presence of intervalley scattering. The intervalley electron-phonon scattering strongly suppresses the in-plane spin relaxation time at high temperature whereas the intervalley short-range scattering plays an important role in the in-plane spin relaxation especially at low temperature. A marked nonmonotonic dependence of the in-plane spin relaxation time on temperature with a minimum of several hundred picoseconds is predicted in the absence of the short-range scatterers. Moreover, a peak in the electron density dependence of the in-plane spin relaxation time at low temperature, which is very different from the one in semiconductors, is predicted. We also find a rapid decrease in the in-plane spin relaxation time with increasing initial spin polarization at low temperature, which is opposite to the situation in both semiconductors and single-layer graphene. A strong anisotropy between the out-of- and in-plane spin relaxations at high temperature is also revealed with the out-of-plane spin relaxation time being about two orders of magnitude larger than the in-plane one. Detailed comparisons of the temperature and electron density dependences of the spin relaxation with the recent experiments are reported.

In Chapter 5, we turn to investigate the electron spin relaxation due to the D'yakonov-Perel' and Elliot-Yafet mechanisms in monolayer MoS₂. We construct the effective Hamiltonian for the lowest conduction band near the K (K') point using the Löwdin partition method. The spin-orbit coupling of the conduction band induces the intra- and inter-valley D'yakonov-Perel' relaxation for in-plane spins. In addition, the Elliot-Yafet spin relaxation also takes place for in-plane spins due to the interband spin mixing. We find that the D'yakonov-Perel' mechanism dominates the in-plane spin relaxation. In the framework of this mechanism, the intravalley process is shown to play a more important role at low temperature whereas the intervalley one becomes more important at high temperature. At the temperature in between, the leading process of the in-plane spin relaxation changes from the intervalley to intravalley one as the electron density increases. Moreover, for the intervalley process, we find that the spin relaxation time decreases with the increase of the temperature, electron density and initial spin polarization. For the intravalley process, the spin relaxation is dominated by the electron-electron Coulomb scattering even with high impurity density, which is very different from the previous studies in semiconductors and graphene. In addition, we find that the out-of-plane spin relaxation time decreases with the increase of the magnetic field. In the above calculation, the effective magnetic fields of the spin-orbit coupling of the conduction and valence bands have the same direction at

K (K') point. However, according to the recent theoretical works, the effective magnetic field of the spin-orbit coupling of the conduction band has the opposite direction to the one of the valence band at K (K') point. We then recalculate the spin relaxation in monolayer MoS₂ and find some new physical properties. For the in-plane spin relaxation, when the electron density is high, the D'yakonov-Perel' spin relaxation time shows a nonmonotonic dependence on the temperature, which is caused by the intervalley spin relaxation process. In addition, the out-of-plane spin relaxation time first decreases then increases with increasing magnetic field.

In addition to the spin relaxation in time domain, we also pay attention to the spin diffusion in spatial domain. In Chapter 6, we study the electron spin diffusion in monolayer MoS₂ in the absence of external electric and magnetic fields. The electron-impurity scattering, which is shown to play a negligible role in spin relaxation in time domain in this material, has a marked effect on the in-plane spin diffusion due to the anisotropic spin precession frequency in spatial domain. With the electron-impurity and intervalley electron-phonon scatterings separately included in the scattering term, we study the intra- and inter-valley diffusion processes of the in-plane spins by analytically solving the kinetic spin Bloch equations. The intravalley process is found to be dominant in the in-plane spin diffusion, in contrast to the case of spin relaxation in time domain, where the intervalley process can be comparable to or even more important than the intravalley one. For the intravalley process, we find that the in-plane spin diffusion is suppressed with the increase of impurity density but effectively enhanced by increasing electron density. We further take into account the electron-electron Coulomb scattering in the intravalley process. Interestingly, we find that in the nondegenerate limit, the intravalley spin diffusion length presents an opposite trend in the electron density dependence compared to the one with only electron-impurity scattering.

In the above chapters, we focus on the carrier spin dynamics in two-dimensional systems. In addition, we also investigate the topological superconductors and Majorana fermions. In Chapter 7, we first introduce the history of Majorana fermions and then review the current status of research on Majorana fermions. At present, the topological superconductors are considered to be the most promising candidate for realizing Majorana fermions. We then introduce several typical topological superconductors including the effective p -wave superconductors and the ones from the quantum anomalous Hall insulators. In Chapter 8, we show that a two-dimensional topological superconductor can be realized in a hybrid system with a conventional s -wave superconductor proximity-coupled to a quantum anomalous Hall state from the Rashba and exchange effects in single-layer graphene. With very low or even zero doping near the Dirac points, this topological superconductor has a Chern number as large as four, which supports four Majorana edge modes.

More importantly, we show that this topological superconductor has a robust topologically nontrivial bulk excitation gap, which can be larger or even one order of magnitude larger than the proximity-induced superconducting gap. This unique property is very different from the previous studies in the effective p -wave superconductors where the bulk excitation gap is always smaller than the superconducting gap from the proximity effect.

Finally, in Chapter 9, we investigate the singlet-triplet relaxation due to the spin-orbit coupling together with the electron-phonon scattering in silicon single and laterally coupled double quantum dots. The electron-electron Coulomb interaction, which is crucial in the electronic structure, is explicitly included. The valley splitting induced by the interface scattering is also taken into account. We employ the exact diagonalization method to obtain the energy spectrum. In the dependence of the energy spectrum on the magnetic field, dot size or interdot distance, the anticrossing/crossing points are observed. In the vicinity of the anticrossing point, an energy gap is opened between the singlet and one of the triplets. We find that the transition rates relevant to these two states calculated from the Fermi golden rule show a peak or a valley. It is emphasized that, in single quantum dots, our model under a parallel magnetic field agrees pretty well with the experimental results and then we identify that the spin relaxation time measured in the experiment is the lifetime of the lowest singlet. Moreover, we predict a peak in the magnetic-field dependence of the singlet-triplet relaxation rate. In double quantum dots, we also investigate the electric-field dependence of the energy spectrum and transition rates. We find that with the increase of the electric field, the configurations of the lowest four energy levels change from (1,1) to (2,0). But the transition rates between these energy levels are almost independent of the electric field. This is of great importance in the spin manipulation since the lifetime remains almost the same during the change of the qubit configuration.

Key Words : semiconductor, graphene, monolayer MoS₂, spin relaxation, spin diffusion, many-body system, Majorana fermion, silicon quantum dots.

目 录

中文摘要	i
英文摘要	v
第一章 自旋电子学背景介绍	1
1.1 自旋电子学	1
1.2 自旋弛豫	4
1.2.1 自旋弛豫机制	4
1.2.2 单层石墨烯中的自旋弛豫	8
1.2.3 双层石墨烯中的自旋弛豫	18
1.2.4 单层 MoS ₂ 中的自旋弛豫	20
1.3 自旋输运	23
1.3.1 漂移-扩散模型	24
1.3.2 空间输运中的非均匀扩展	24
1.3.3 小结	25
第二章 动力学自旋 Bloch 方程和自旋弛豫机制	27
2.1 动力学自旋 Bloch 方程	27
2.2 时间域的自旋弛豫	30
2.2.1 Elliott-Yafet 自旋弛豫机制	30
2.2.2 D'yakonov-Perel' 自旋弛豫机制	31
2.3 空间域的自旋输运	32

第三章 (111) GaAs 量子阱中的载流子自旋弛豫	35
3.1 (111) GaAs 量子阱中电子自旋弛豫的理论研究	35
3.1.1 哈密顿量	35
3.1.2 数值结果	37
3.2 (111) GaAs 量子阱中电子自旋弛豫的实验研究	40
3.3 (111) GaAs 量子阱中的空穴自旋弛豫	41
3.3.1 轻重空穴的有效哈密顿量	41
3.3.2 动力学自旋 Bloch 方程	43
3.3.3 数值结果	45
3.4 小结	49
第四章 双层石墨烯中的电子自旋弛豫	51
4.1 哈密顿量	51
4.2 双层石墨烯中的动力学自旋 Bloch 方程	53
4.3 数值结果	55
4.3.1 高迁移率的双层石墨烯中的自旋弛豫	55
4.3.2 与实验结果的比较	59
4.4 小结	64
第五章 单层 MoS₂ 中的电子自旋弛豫	67
5.1 单层 MoS ₂ 中的谷间自旋弛豫过程	67
5.1.1 哈密顿量和动力学自旋 Bloch 方程	67
5.1.2 自旋弛豫对温度的依赖	68
5.1.3 自旋弛豫对电子浓度的依赖	69
5.1.4 初始自旋极化对自旋弛豫的影响	69
5.2 单层 MoS ₂ 中的谷内及谷间自旋弛豫过程	71
5.2.1 哈密顿量以及动力学自旋 Bloch 方程	71
5.2.2 平面内自旋弛豫	74
5.2.3 平面外自旋弛豫	79

5.3	单层 MoS ₂ 中自旋弛豫的最新进展	80
5.3.1	平面内自旋弛豫	80
5.3.2	平面外自旋弛豫	81
5.4	小结和讨论	83
第六章	单层 MoS₂ 中的电子自旋扩散	85
6.1	模型和动力学自旋 Bloch 方程	86
6.2	解析研究	86
6.2.1	谷内自旋扩散过程	86
6.2.2	谷间自旋扩散过程	88
6.2.3	结果	89
6.3	小结	92
第七章	拓扑超导体以及 Majorana 费米子背景介绍	95
7.1	引言	95
7.2	拓扑分类和拓扑不变量	98
7.3	有效 p 波超导体	100
7.3.1	无自旋手征 p 波超导体模型	100
7.3.2	拓扑绝缘体	102
7.3.3	半导体纳米线	104
7.3.4	铁磁原子构型	109
7.3.5	其它方案	113
7.4	基于量子反常霍尔绝缘体的拓扑超导体	116
第八章	单层石墨烯中实现具有大 Chern 数和大体能隙的拓扑超导体	119
8.1	单层石墨烯中的量子反常霍尔态	120
8.1.1	哈密顿量和能谱	120
8.1.2	Chern 数和量子反常霍尔态	121
8.2	基于单层石墨烯的拓扑超导体	122

8.2.1	哈密顿量	122
8.2.2	拓扑不变量和拓扑相图	123
8.2.3	Majorana 边界态	126
8.2.4	拓扑超导体的能隙	126
8.2.5	基于量子反常霍尔态的拓扑超导体的实验方案	128
8.3	小结	129
第九章	硅量子点中的单三态弛豫	131
9.1	背景介绍	131
9.2	单量子点	132
9.2.1	模型和方法	132
9.2.2	数值结果	135
9.3	双量子点	143
9.3.1	模型和方法	143
9.3.2	数值结果	146
9.4	小结	152
第十章	总结	153
附录A	(111) GaAs 量子阱中的一些补充说明	157
A.1	轻重空穴的有效质量和自旋轨道耦合系数	157
A.2	公式 (3.5) 中 $H_L, H_{8v8v}^b, H_\epsilon$ 的具体形式	158
A.3	空穴子带间的自旋混合 $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$	160
A.4	利用对称性分析得到电子以及轻重空穴的自旋轨道耦合形式	160
附录B	双层石墨烯中最低导带电子的自旋轨道耦合	163
附录C	单层 MoS₂ 中的一些补充说明	169
C.1	利用对称性分析得到单层 MoS ₂ 中电子的自旋轨道耦合形式	169
C.2	单层 MoS ₂ 中电子-电子库仑散射导致的自旋弛豫的相关推广	169

附录D 对第 8 章的一些补充说明	173
D.1 BdG 哈密顿量 $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ [公式 (8.11)] 的能隙闭合条件	173
D.2 zigzag 和 armchair 边界的石墨烯纳米带中 Majorana 边界态的计算方法 .	175
参考文献	179
本硕博期间发表的论文	193
致谢	195

第一章 自旋电子学背景介绍

1.1 自旋电子学

自旋电子学 (spintronics) 这个名词是由 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提案中最先使用的 [1,2]。它是在传统的基于电荷的电子学基础上引入自旋自由度来取代或者结合电荷自由度而发展起来的一门学科 [1-9]，该学科跟凝聚态物理中的很多分支比如说半导体物理、光学、磁学、介观物理以及超导等都有很紧密的联系。自旋电子学的最终目的是希望通过研究如何有效地控制固体系统中的自旋自由度从而制造出实用的自旋电子学器件，这些自旋电子学器件跟传统的基于电荷的电子学器件相比具有非易失性、数据处理速度更快、能耗更低、集成度更高等很多优势。

下面我们就从自旋电子学器件的角度出发来讨论一下自旋电子学。Awschalom 等人将自旋电子学器件分成三类 [10]。第一类自旋电子学器件是以磁电子学为基础，最早集中在磁性金属材料中。在 1988-1989 年，Fert 小组 [11]在 Fe-Cr (铁磁金属/正常金属) 超晶格结构中以及 Grünberg 小组 [12]在 Fe-Cr-Fe (铁磁金属/正常金属/铁磁金属) 三明治结构 (参见图 1-1 左图) 中分别独立发现了巨磁阻 (giant magnetoresistance, GMR) 效应，这一重大发现被认为是自旋电子学的开端。巨磁阻效应指的是体系的电阻在外加磁场的作用下可以有非常明显的改变，其物理原因在于在没有外加磁场的时候相邻铁磁层之间是反铁磁耦合的，因而磁矩取向是反平行的 (参见图 1-1 左图)，此时体系的电阻最大，当外加磁场超过铁磁材料矫顽场的时候磁矩取向变为平行，体系的电阻最小。在此基础上人们提出了更好操控的自旋阀 (spin valve) 结构如图 1-1 右图所示，两个铁磁层之间几乎没有耦合，其中一个铁磁层的磁矩取向被固定，对外加磁场很不敏感，而另一个铁磁层的磁矩取向可以通过外加磁场自由调节 [13-16]。自旋阀结构很快被发现可以制成硬盘读磁头，这一技术革命将计算机硬盘的磁记录密度提高了接近 5000 倍，使得容量大、体型小的硬盘成为了可能，这给人们的生活带来了极大的便利。在 GMR 效应之后人们又发现了更多的磁阻效应。Helmolt 等人 [17]在类钙钛矿结构的稀土锰氧化物材料比如 $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ 中发现了磁电阻比 GMR 效应还大的庞磁阻 (colossal magnetoresistance, CMR) 效应。紧接着 Xiong 等人 [18]在 $\text{Nd}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 中观测到了高达 $10^6\%$ 的庞磁电阻。虽然具有 CMR 效应的材料具有极高的磁阻，但高磁阻出现的条件比较苛刻 (低温及强磁场)，目前还很难有实际应用。此外，将 Grünberg 小组 [12]提出的三明治结构中的

正常金属（非铁磁金属）替换成绝缘层可以观测到磁电阻比 GMR 效应更大的隧道磁阻（tunneling magnetoresistance, TMR）效应 [19–21]。利用 TMR 效应制成的硬盘磁头已经逐渐取代 GMR 磁头，因为 TMR 磁头更灵敏、存储密度更大还能抗静电和高温。GMR 和 TMR 效应还可以应用到磁随机存储器（magnetoresistive random access memory, MRAM）中去，MRAM 具有读写快速、存储容量大等优点，更重要的是在断电情况下信息不会丢失。鉴于 GMR 效应的发现对社会发展做出的巨大贡献，Albert Fert 和 Peter Grünberg 被授予了 2007 年度的诺贝尔物理学奖。

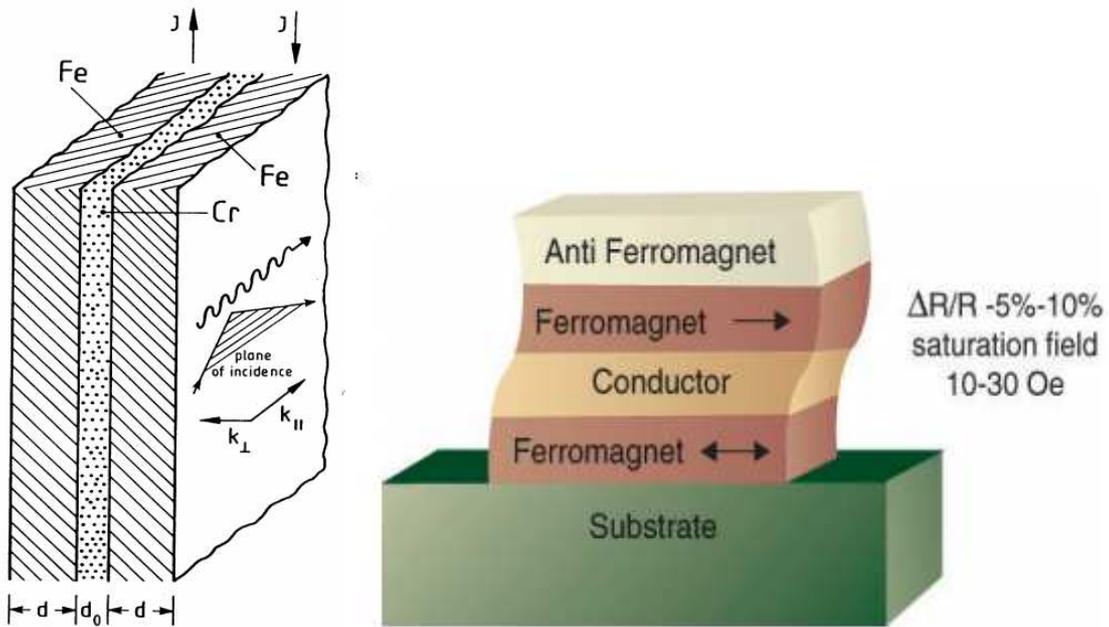


图 1-1: 左图: Fe-Cr-Fe（铁磁金属/正常金属/铁磁金属）三明治结构。摘自文献 [12]。右图: 自旋阀结构。摘自文献 [1]。

第二类自旋电子学器件指的是自旋晶体管，可能的设计方案包括自旋场效应管（spin field effect transistor） [22–29]、单极自旋晶体管 [30–32]、磁双极晶体管 [33–37]、磁 p - n 结 [38–40]、热电子自旋晶体管 [41–43] 等。这里我们主要介绍一下 Datta 和 Das 在 1990 年提出的自旋场效应管方案 [22]，该方案一般被认为是第二类自旋电子学器件的开端。如图 1-2 所示，自旋场效应管两端为铁磁材料做成的源漏电极（源漏电极分别用于注入和探测电子自旋），电极之间由导体通道相连，在通道上施加了一个门电压，该门电压破坏了体系的界面反演对称性会在通道内产生 Rashba 自旋轨道耦合 [44]，自旋轨道耦合的强度可以通过门电压来调节。当电子自旋跟漏电极的自旋取向平行的时候可以进入电极，我们称这个状态为开，当电子自旋跟漏电极自旋取向反平行的时候会被完全反射回去，这个对应的状态为关。开和关的状态可以通过自旋轨道耦合进行操控，这里自旋轨道耦合可以看成是一个有效磁场，当电子自旋方向跟有效磁场不平行的时候就会发生进动，这样电子到达漏电极时的自旋方向很有可能发生改变。从这里我们可以看出，自旋场效应管跟传统的基于电荷的场效应管相比具有开关速度快、

能耗低等显著优点，这是因为自旋场效应管不需要通过改变势垒高度来实现开关。但是要想在实验上实现自旋场效应管还有很多问题需要解决。在实际材料中，即使迁移率很高，散射也不可避免地存在着，一方面散射会破坏自旋轨道耦合对自旋方向的相干操控，另一方面散射会跟自旋轨道耦合一起使得自旋极化信号在从源电极到漏电极传输的过程中发生衰减，这里的衰减过程包括时间域的自旋弛豫（参见章节 1.2）跟空间域的自旋扩散（参见章节 1.3）。在过去的二十多年里，有关 Datta-Das 自旋场效应管的实验进展一直比较缓慢，直到最近的 2009 年，Koo 等人 [29] 报告称已经在 InAs 量子阱中实现了 Datta-Das 自旋场效应管。这在当时引起不小的关注跟争论 [45–48]，争论的焦点在于实验结果不能很好地用 Datta-Das 自旋场效应管理论模型来解释。尽管如此，实验中利用门电压进行调控并实现了开和关的状态这一基本事实是不能否认的，我们可以认为 Koo 等人在实现 Datta-Das 自旋场效应管上已经迈出了很大的一步，部分实现了自旋场效应管的功能。

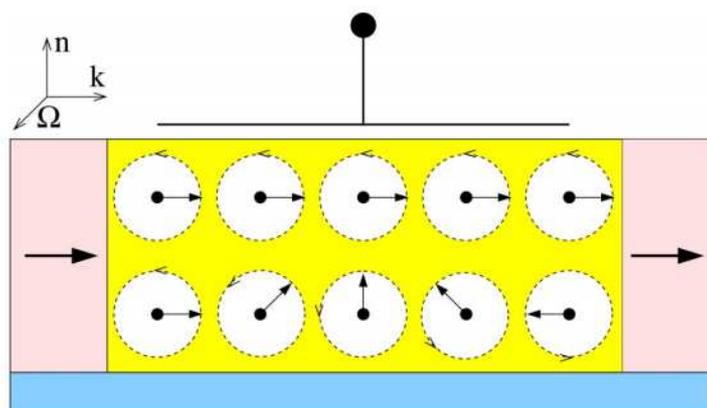


图 1-2: Datta-Das 自旋场效应管模型。两端对应的是源漏电极，都是铁磁材料，中间是一个导体通道，通道上施加了一个门电压，该门电压可以控制通道内 Rashba 自旋轨道耦合的强度。摘自文献 [2]。

第三类自旋电子学器件的最终目标是希望利用电子的自旋自由度来制造出固态量子计算机 [49–51]。量子计算机中的基本单元是量子比特（quantum bit, qubit），这就跟经典的数字计算机中基本单元是比特类似。量子比特本质上来说是一个可控的量子化的两能级系统，最简单的一个例子就是电子自旋的两个分量，从某种意义上说电子自旋就是一个天然的量子比特。要实现量子计算机必须先找到一个合适的载体，在这个载体中能够操控单个或者少量的电子自旋并且有希望扩展到多自旋系统实现大规模集成。半导体量子点系统是一个很好的候选，它拥有可控的量子化能级（能级间距可由量子点大小来调节），退相干时间很长的自旋态，另外利用现有的半导体微纳技术，量子点很有可能实现大规模的扩展 [52]。在 1998 年，Loss 和 DiVincenzo 最先在 GaAs 量子点中提出了基于自旋的量子计算模型 [53]，如图 1-3 所示，每个量子点中的电子自旋构成一个量子比特，可以独立地通过外加的垂直于自旋取向的磁场进行操控（这个过程被称为单个量子比特操作），相邻的两个量子点中电子是通过交换相互作用耦合在一起的，交

换相互作用的大小可以用门电压来调节（这个过程被称为双量子比特操作）。在这之后，量子点受到了极大关注，无论实验还是理论都有大量的报道，材料涉及 III-V 族半导体 [52, 54–65]、硅 [66–79] 等，量子点的数目也逐渐从单个 [59, 61, 73, 74, 78] 发展到多个 [55, 56, 70, 71, 75–77, 79]。但总的来说，这个领域还处在比较初级的阶段，要实现量子计算还有非常长的路要走。

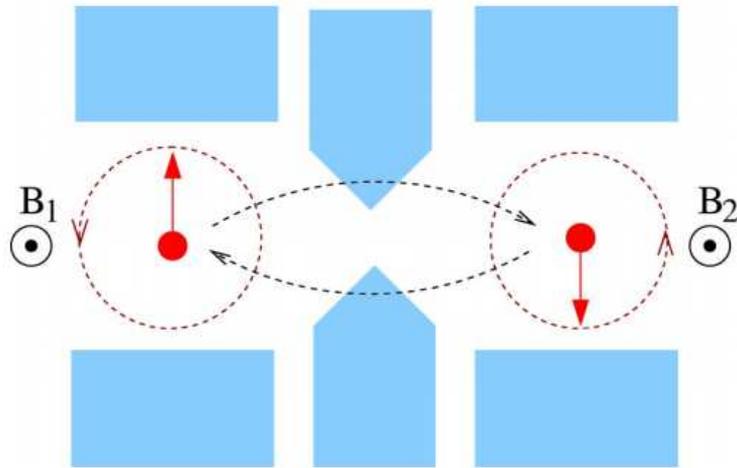


图 1-3: 电极约束的量子点构成的量子计算模型示意图。每个量子点中的电子自旋构成一个量子比特，可以通过外加磁场进行调控，相邻的两个量子点中电子是通过交换相互作用耦合在一起的，交换相互作用的大小可以通过门电压调节。摘自文献 [2]。

1.2 自旋弛豫

1.2.1 自旋弛豫机制

在上一章节，我们讲了各种自旋电子学器件，这些器件大多要求能够对电子自旋进行操控，而要实现操控的目的就要使自旋寿命远比操作时间来得长。由此可见，关于自旋寿命即自旋弛豫时间的研究对自旋电子学器件的实现起着非常重要的作用。这里我们简单介绍一下跟我们研究密切相关的几种主要的自旋弛豫机制，包括 Elliott-Yafet (EY) 机制 [80, 81]，D'yakonov-Perel' (DP) 机制 [82] 以及 Bir-Aronov-Pikus (BAP) 机制 [83]。

1.2.1.1 Elliott-Yafet 自旋弛豫机制

当电子在晶格中运动的时候，由于相对论效应的存在电子会感受到一个被称为原子

自旋轨道耦合的作用，其具体形式为

$$H_{\text{so}} = \frac{1}{4m_0^2c^2} [\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}] \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.1)$$

这里 m_0 , c , \mathbf{p} 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 分别表示自由电子的质量, 真空中的光速, 电子的动量算符以及自旋空间的泡利矩阵, 另外 $V(\mathbf{r})$ 是电子感受到的势场包括晶格中离子实提供的周期势和可能的外加电势, 这里我们讨论只有周期势存在的情况。Elliott 在 1954 年最早指出 [80], 上述的原子自旋轨道耦合会使得电子的波函数出现自旋混合, 即原先的自旋态 (在合适的基下可以是纯的自旋上或者自旋下) 中将会混入自旋相反的成分, 这样一来自旋守恒的散射 (比如电子-声子散射或者电子-杂质散射) 可以造成原先自旋不同的态之间发生跃迁, 从而引起自旋翻转导致电子的自旋驰豫, 这个自旋驰豫过程被称为 Elliott 机制。我们以中心反演对称的材料 (比如 Si 等) 为例来具体分析一下, 由中心反演对称和时间反演对称可知, 能带 n 上动量为 \mathbf{k} 的一组简并的电子 Block 态可以写成

$$\phi_{\mathbf{k}n\uparrow}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [a_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})|\uparrow\rangle + b_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})|\downarrow\rangle], \quad (1.2)$$

$$\phi_{\mathbf{k}n\downarrow}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [a_{-\mathbf{k}n}^*(\mathbf{r})|\downarrow\rangle - b_{-\mathbf{k}n}^*(\mathbf{r})|\uparrow\rangle], \quad (1.3)$$

其中第一 (二) 个波函数表示的是自旋向上 (下) 的态中混入了自旋向下 (上) 的成分, 这里波函数中的自旋混合就是原子自旋轨道耦合引起的。很容易看出, 自旋守恒的散射会在这两个态之间造成耦合从而导致自旋驰豫, 自旋驰豫的时间是跟动量散射时间成正比的。

上面我们讨论的是晶格中离子实处于平衡位置的情况, 实际上, 在有限温度下, 晶格会发生振动离子实会偏离平衡位置。此时原子自旋轨道耦合 [参见公式 (1.1)] 会造成声子和电子自旋的耦合, 从而导致不同的自旋态之间可以直接翻转引起自旋驰豫。这个过程最早是由 Overhauser 在金属中提出的 [84] 之后由 Yafet 在具体的能带中讨论研究的 [81]。这种自旋驰豫过程被称为 Yafet 机制, Yafet 机制和上面讲过的 Elliott 机制往往被统称为 EY 机制。需要指出的是 EY 机制一般在空间反演对称的体系或者空穴型掺杂的块体材料中比较重要, 前者是因为其它自旋驰豫机制被很强地压制, 后者是由于空穴波函数中的自旋混合比较大。

1.2.1.2 D'yakonov-Perel' 自旋驰豫机制

在上一小节讨论 Elliott 机制的时候, 我们指出原子自旋轨道耦合 [参见公式 (1.1)] 可以引起电子波函数的自旋混合。实际上, 除此之外, 原子自旋轨道耦合还有可能造成动量相同而自旋相反的电子态之间能量不简并即出现自旋劈裂 $E_{\mathbf{k}\uparrow} \neq E_{\mathbf{k}\downarrow}$, 这种自旋劈裂要求体系的空间反演对称破缺。在空间反演对称破缺的体系中我们有 $E_{\mathbf{k}\uparrow} \neq E_{-\mathbf{k}\uparrow}$ (这里不考虑偶然简并的情况), 另外体系具有时间反演对称性保证

了 $E_{-\mathbf{k}\uparrow} = E_{\mathbf{k}\downarrow}$ ，这样我们很容易得到 $E_{\mathbf{k}\uparrow} \neq E_{\mathbf{k}\downarrow}$ 。目前来说，空间反演对称破缺主要有两种形式，第一种是体中心反演对称破缺（bulk inversion asymmetry, BIA），相应的体系有常见的 III-V 族和 II-VI 族半导体等，此时引起自旋劈裂的哈密顿量被称为 Dresselhaus 自旋轨道耦合 [85]；第二种是结构反演对称破缺（structure inversion asymmetry, SIA），比较常见的实现方法有约束和外加电场等，自旋劈裂对应的哈密顿量被称为 Rashba 自旋轨道耦合 [44]。这两种自旋轨道耦合都可以一般性地写成以下形式

$$H_{\text{so}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.4)$$

其中 $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ 可以看作是一个动量依赖的有效磁场，Winkler 对它的具体形式已经做了非常详细的讨论和研究 [86]，这里就不再赘述。当电子自旋取向跟有效磁场 $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ 不平行的时候就会发生进动，由于有效磁场是动量依赖的，因此动量不同的电子沿着不同的有效磁场进动，我们把这种动量依赖的有效磁场称为非均匀扩展（inhomogeneous broadening）[7, 87]。非均匀扩展跟任何散射包括自旋守恒散射和自旋翻转散射一起都会引起不可逆的自旋弛豫，这种自旋弛豫机制被称为 DP 机制 [82]。

下面我们讨论一下非均匀扩展和散射对 DP 自旋弛豫的影响。在没有散射的时候，电子自旋极化会在非均匀扩展的作用下发生可逆的衰减，这个过程被称为自由演化衰减，当考虑散射后，自旋极化的可逆衰减会变成不可逆的弛豫。具体来说散射对自旋弛豫有两方面影响，一方面散射提供了自旋弛豫通道，散射越强自旋弛豫越快，另一方面散射会抑制非均匀扩展，散射越强自旋弛豫越慢，最终自旋弛豫与散射的关系是由两方面竞争决定的。在弱散射区即 $\langle |\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})| \rangle_{\tau_p} > 1$ （ $\langle \dots \rangle$ 表示对电子系综平均），散射对非均匀扩展的抑制作用很有限，主要提供自旋弛豫通道，此时自旋弛豫时间是跟动量散射时间 τ_p 成正相关的关系。当散射增强进入强散射区（ $\langle |\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})| \rangle_{\tau_p} < 1$ ）的时候，散射除了提供弛豫通道外对非均匀扩展的抑制作用也变得非常明显，此时很难简单判断自旋弛豫时间与动量散射时间之间的关系。于是我们借助随机行走模型来估算一下自旋弛豫时间 [2, 3]。在相邻两次散射之间电子自旋进动角度为 $\delta\phi = |\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|\tau_p$ ，经过 $N = t/\tau_p$ 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 $\langle \Delta\phi(t = \tau_s)^2 \rangle \sim 1$ 近似给出，我们可以得到 τ_s （自旋弛豫时间）跟 τ_p 满足以下关系

$$\tau_s^{-1} \sim \langle \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})^2 \rangle_{\tau_p}, \quad (1.5)$$

由此可见散射越强自旋弛豫越慢，这跟弱散射区的结果完全相反。有关公式 (1.5) 的更详细更严格的解析推导会在章节 2.2.2 中给出。上面关于 DP 自旋弛豫的讨论是在无外磁场情况下的，当施加一个强外磁场后结果变得很不一样。虽然均匀的外磁场本身不提供非均匀扩展，但是它可以提供进动使得原先由自旋轨道耦合引起的非均匀扩展发生明显地改变，进而影响自旋弛豫的行为 [88–90]。当外磁场和初始自旋极化分别垂直和平行于自旋轨道耦合的有效磁场的时候，自旋弛豫时间在弱（强）散射下可以表现

出 $\tau_s \propto \tau_p^{-1}$ (τ_p) 的行为，这与之前无外磁场下自旋弛豫的行为是完全相反的。

在本小节最后我们对公式 (1.5) 中的动量散射时间 τ_p 做一些说明。在自旋守恒散射中， τ_p 的来源除了我们熟知的电子-杂质和电子-声子散射外，还有电子-电子库仑散射 [91,92]，因为这些散射都可以改变电子的动量。但在早期对半导体材料的研究中，电子-电子库仑散射的影响往往被忽视，人们普遍认为库仑散射对迁移率没有贡献因而也不会影响动量散射以及自旋弛豫。直到 2000 年，Wu 等人在理论上最早指出电子-电子库仑散射对自旋弛豫有贡献 [91]。紧接着俄罗斯 Ioffe 所的 Ivchenko 理论组也得到了类似的结论 [92]。之后 Wu 等人又开展了一系列工作来研究电子-电子库仑散射对自旋弛豫的影响 [7,93-105]，他们指出库仑散射在高迁移率和本征型的量子阱中对自旋弛豫起着非常重要的作用 [96-98]，实验上也证实了这一点 [106-110]。

1.2.1.3 Bir-Aronov-Pikus 自旋弛豫机制

当体系中同时存在电子和空穴的时候，电子-空穴交换相互作用可以导致电子的自旋弛豫，这个自旋弛豫过程被称为 BAP 机制 [83]。具体来说，电子-空穴交换相互作用的费曼图如图 1-4 左图所示（这里以重空穴为例），自旋为 $3/2$ 的重空穴和自旋为 $-1/2$ 的电子湮灭而产生了自旋为 $-3/2$ 的重空穴和自旋为 $1/2$ 的电子，重空穴和电子自旋都实现了翻转。一般而言，在半导体材料中空穴的自旋弛豫远比电子来得快 [3,7]，这时候可以近似认为空穴处于无自旋极化的平衡状态，只剩下电子的自旋弛豫过程 [97,99]。当然也有些特殊情况，比如 (111) GaAs 量子阱中空穴的自旋弛豫时间可以跟电子的差不多大的时候甚至可以大一个量级 [111]，此时空穴不能再近似成平衡状态了。

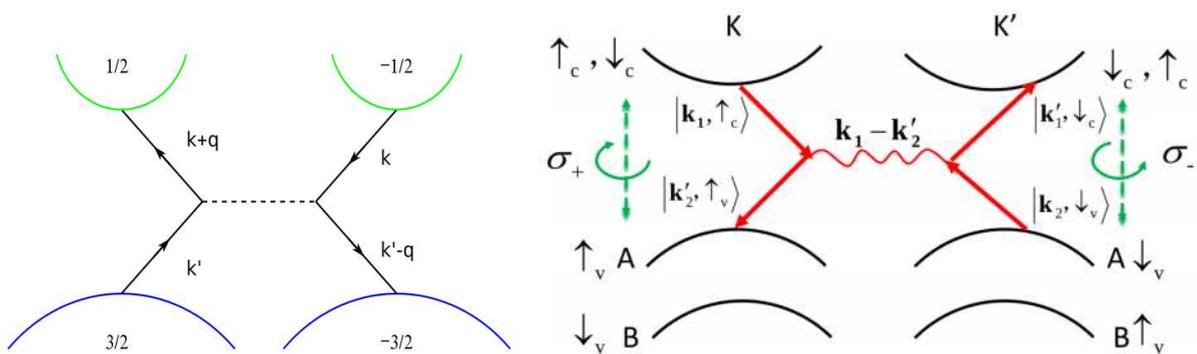


图 1-4: 电子-空穴交换相互作用费曼图。左图: $\pm 1/2$ ($\pm 3/2$) 表示电子 (重空穴) 自旋。右图: K 和 K' 是谷自由度。摘自文献 [112]。

电子与轻、重空穴之间交换相互作用的具体形式为 [102, 113, 114]

$$V^{\text{ex}}(\mathbf{K}) = \frac{1}{2} \tilde{J}_-(\mathbf{K}) S_+ + \frac{1}{2} \tilde{J}_+(\mathbf{K}) S_- + \tilde{J}_z(\mathbf{K}) \cdot S_z. \quad (1.6)$$

这里我们同时考虑了短程和长程的贡献， \mathbf{K} 是电子空穴对的总动量； $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$ 表示电子自旋的升降算符； \tilde{J}_i 可以写成（基的选择依次为空穴自旋 $3/2, 1/2, -1/2, -3/2$ ）

$$\tilde{J}_i = \frac{1}{2}\pi a_B^3 \left[-\Delta E_{\text{SR}} J_i + \frac{3}{4}\Delta E_{\text{LT}} M_i(\mathbf{K}) \right], \quad (1.7)$$

$$M_{\pm}(\mathbf{K}) = M_{\pm}(\mathbf{K})^{\dagger} = \frac{2}{3K^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}K_{\parallel}^2 & 2K_z K_{\pm} & K_{\pm}^2 & 0 \\ 2\sqrt{3}K_z K_{\pm} & -4K_z^2 & -2K_z K_{\pm} & 0 \\ 3K_{\pm}^2 & -2\sqrt{3}K_z K_{\pm} & -\sqrt{3}K_{\parallel}^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

$$M_z(\mathbf{K}) = \frac{1}{3K^2} \begin{pmatrix} -3K_{\parallel}^2 & 2\sqrt{3}K_z K_{\pm} & \sqrt{3}K_{\pm}^2 & 0 \\ 2\sqrt{3}K_z K_{\pm} & (K_{\parallel}^2 - 4K_z^2) & -4K_z K_{\pm} & -\sqrt{3}K_{\pm}^2 \\ \sqrt{3}K_{\pm}^2 & -4K_z K_{\pm} & (4K_z^2 - K_{\parallel}^2) & 2\sqrt{3}K_z K_{\pm} \\ 0 & -\sqrt{3}K_{\pm}^2 & 2\sqrt{3}K_z K_{\pm} & 3K_{\parallel}^2 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

a_B 表示玻尔半径； ΔE_{SR} 为激子态的单三态劈裂，是短程交换相互作用的特征能量，而 ΔE_{LT} 是纵向-横向劈裂，为长程交换相互作用的特征能量； J_{\pm} 代表空穴自旋的升降算符； $K_{\parallel}^2 = K_x^2 + K_y^2$ ， $K_{\pm} = K_x \pm iK_y$ 。

上面讨论的电子-空穴交换相互作用能够引起电子和空穴的自旋翻转导致自旋弛豫。实际上，除了自旋自由度外，电子-空穴相互作用还能被应用到两能谷系统中去。最近，Yu 和 Wu [112] 通过理论研究发现在单层 MoS_2 中电子-空穴交换相互作用可以使激子态从一个能谷 (K) 跃迁到另一个能谷 (K') 中去（费曼图如图 1-4 右图所示），给激子态的谷极化弛豫提供了一种可能性。他们利用这个理论机制很好地解释了最近的很多相关实验，比如时间可分辨的谷极化实验 [115]、泵浦探测实验 [116, 117]、稳态光致发光实验 [118–122] 等。

1.2.2 单层石墨烯中的自旋弛豫

半导体材料中的自旋弛豫已经有不少综述文章做了总结讨论 [2, 6–8]，这里就不再赘述。在本小节中，我们主要讲一下单层石墨烯中的自旋弛豫。单层石墨烯是在 2004 年才被实验首次得到 [123]，它的晶格如图 1-5 左图所示，是由一层碳原子组成的六角形蜂窝状结构，这是第一个真正意义上的二维材料，在这之后各种各样的二维材料相继被实验发现。单层石墨烯具有非常特殊的能带结构，在最低的两个不等价能谷 K 和 K' （参见图 1-5 中图）附近能动量成线性关系如图 1-5 右图所示，这种能谱一般被称为类 Dirac 能谱，两个能谷 K 和 K' 被称为 Dirac 点 [124]。除此之外，单层石墨烯还有非常好的自旋性质比如说超精细相互作用和自旋轨道耦合都很弱 [125–135]，这些特性意味着石墨烯中的自旋弛豫时间可能会非常长，一些理论工作计算表明弛豫时间能达到 μs 量级 [104, 133, 136, 137]。但是目前单层石墨烯中大量的自旋输运实验测量到的自旋弛豫时间却在 0.1–1 ns 量级 [138–150]，比理论预计的要小三到四个量级。

这个显著的差异吸引了非常多的关注，人们试图寻找各种可能的的外在因素比如门电压提供的外加电场 [125–127, 132, 134]、表面附着原子 [134, 136, 151–155]、结构的弯曲或褶皱 [126, 156–158]、衬底 [136, 159, 160]、接触电极 [143, 149, 161, 162] 等来解释，但到现在还没有一个明确的结论。这些理论解释之所以没有定论，是因为很多实验结果本身就存在很大的争议，比如说有的实验报道自旋弛豫率和动量弛豫率之间存在线性依赖关系 [142, 143, 147] 但有的实验却发现自旋弛豫对自旋守恒的动量散射不敏感 [163, 164]。接下来我们将对单层石墨烯中相关理论实验研究做一个更详细的讨论。

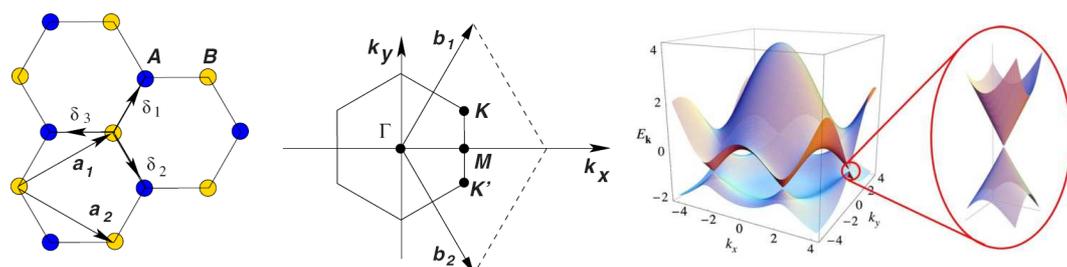


图 1-5: 单层石墨烯中的晶格结构（左图），倒易空间中的第一布里渊区（中图）以及能带结构（右图）。其中，左图中 A 和 B 表示一个原胞中的两个代表格点；中图中的 K 和 K' 代表最低的两个不等价能谷；右图中红色圆圈中是 K 或者 K' 点附近的能谱。摘自文献 [124]。

1.2.2.1 理想的单层石墨烯中自旋弛豫的理论研究

在本小节我们主要介绍一下在理想的单层石墨烯中自旋弛豫的理论研究。这里理想的单层石墨烯指的是不考虑表面附着原子、电极接触、弯曲以及衬底的影响，我们唯一考虑的是门电压引起的垂直电场的贡献，这是因为在实验上载流子浓度的有效调节离不开门电压，而其它因素的作用原则上可以被很强地压制。先不考虑垂直电场的影响，体系是中心反演对称的，导带或价带没有自旋劈裂因而不存在 DP 自旋弛豫，此时只有 EY 机制的贡献。当体系的费米能 ε_F 远大于本征自旋轨道耦合强度 λ_I 的时候（目前实验上都满足这个条件），由 EY 机制导致的自旋弛豫时间可近似为 [133]

$$\tau_s^{\text{EY}} \approx (\varepsilon_F / \lambda_I)^2 \tau_p. \quad (1.10)$$

根据第一性原理和紧束缚的计算结果（考虑了 d 轨道的贡献）， λ_I 在 $10 \mu\text{eV}$ 左右 [132, 134, 135]。另外选择典型的实验参数 $\varepsilon_F = 100 \text{ meV}$ 和 $\tau_p = 10 \text{ fs}$ ，我们可以估算得到自旋弛豫时间 τ_s^{EY} 为 $1 \mu\text{s}$ 左右。这个自旋弛豫时间可以说是单层石墨烯中自旋寿命的上限。

接下来我们考虑门电压引起的垂直电场的影响。垂直电场破坏了体系的结构反演对称性会诱导出 Rashba 自旋轨道耦合 [44]，Rashba 自旋轨道耦合会使能带出现自旋劈裂导致 DP 自旋弛豫同时还会引起导带和价带的波函数出现自旋混合对应 EY 自旋弛

豫。DP 自旋弛豫时间可以用以下关系来计算 [133]

$$\tau_s^{\text{DP}} \approx \lambda_R^{-2} \tau_p^{-1}, \quad (1.11)$$

这其实就是我们前面讨论过的在无外磁场的时候 DP 自旋弛豫时间跟动量散射时间在强散射区的关系。Rashba 自旋轨道耦合强度 $\lambda_R = \alpha_R E_z$, $\alpha_R \approx 5 \mu\text{eV}/(\text{V}/\text{nm})$ [132,134], 在典型的电场 $E_z = 300 \text{ kV}/\text{cm}$ 下 $\lambda_R \approx 0.15 \mu\text{eV}$ 。估算得到的 DP 自旋弛豫时间 τ_s^{DP} 约为 $100 \mu\text{s}$ 量级。需要指出的是这个估算是基于非常简单的单体公式, 为了得到比较准确的 DP 自旋弛豫时间, Zhou 和 Wu [104] 利用动力学自旋 Bloch 方程的方法从微观上进行了非常仔细的研究, 他们严格地考虑了所有相关的散射尤其是电子-电子库仑散射, 计算得到的自旋弛豫时间在几十微秒左右。另外 Rashba 自旋轨道耦合导致的 EY 自旋弛豫时间可以用公式 (1.10) 得到, 但要將 λ_I 替换成 λ_R , 通过简单计算可得 $\tau_s^{\text{EY}} \approx 10 \text{ ms}$, 这要远长于本征自旋轨道耦合引起的自旋弛豫时间, 因此 EY 机制中本征自旋轨道耦合的贡献占主导地位。再来比较 EY 机制和 DP 机制, 我们发现就目前的参数下得到结果来看 EY 机制更重要。但这个结论只是在 Rashba 自旋轨道耦合很小的时候才成立, 实际上, Rashba 自旋轨道耦合在外在因素的影响下可以变得比本征自旋轨道耦合来的大甚至远大, 这个时候 EY 机制中本征自旋轨道耦合的贡献可以忽略不计, 自旋弛豫时间为 $\tau_s^{\text{EY}} \approx (\varepsilon_F/\lambda_R)^2 \tau_p$ 。于是我们有 $\tau_s^{\text{EY}}/\tau_s^{\text{DP}} = (\varepsilon_F \tau_p)^2$, 对单层石墨烯中的大部分实验而言 $(\varepsilon_F \tau_p)^2 \gg 1$, 此时 DP 机制占主导地位。除了垂直电场外其它外在因素对自旋弛豫的影响会在后面的小节 (参见 1.2.2.3 和 1.2.2.4) 中详细讨论。

1.2.2.2 单层石墨烯中自旋弛豫的实验研究

自旋弛豫的实验探测主要包括光学和电学方法, 其中光学方法要求体系具有自旋依赖的光学选择定则而电学方法没有特别的要求主要是基于自旋阀结构的自旋输运测量。单层石墨烯中导带价带间虽然可以发生光学跃迁但是该跃迁不会引起电子的自旋极化, 因而实验探测只能采用电学方法。在 2007 年, van Wees 小组 [138] 首次在实验上报道了单层石墨烯中的自旋弛豫测量, 实验装置如图 1-6 左图所示, 是一个四端非局域的自旋阀结构, 四个电极均为铁磁电极 (实际上 1 和 4 可以是非磁性电极), 自旋极化从电极 3 中注入向左边扩散, 使得最左边的两个磁性电极之间出现自旋依赖的电势差进而得到非局域磁阻 R_{NL} 。具体来说, 实验中是利用 Hanle 效应来得到非局域磁阻与外加的垂直于自旋极化的小磁场之间的关系如图 1-6 右图所示, 上 (下) 图对应电极 2 和 3 中磁矩平行 (反平行) 时的磁阻 R_{NL}^{P} ($R_{\text{NL}}^{\text{AP}}$)。利用 Hanle 线形

$$R_{\text{NL}} \propto \int_0^{\infty} dt \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left[-\frac{L^2}{4Dt} - \frac{t}{\tau_s}\right] \cos(\omega_B t) \quad (1.12)$$

对实验信号进行拟合可以同时得到自旋弛豫时间 τ_s 和扩散系数 D , 这里需要指出的是拟合的时候有两种方法, 一种是分别拟合 R_{NL}^{P} 和 $R_{\text{NL}}^{\text{AP}}$, 另一种是拟合 $\Delta R_{\text{NL}} =$

$R_{\text{NL}}^{\text{P}} - R_{\text{NL}}^{\text{AP}}$ ，在以后的实验中基本采用第二种方法便于排除背景的影响。他们通过拟合发现自旋驰豫时间在 100 ps 左右，远小于理论预期的 μs 量级（参见章节 1.2.2.1）。在这之后单层石墨烯中的自旋驰豫测量受到了极大的关注，接下来我们将相关实验做一个简单的分类总结。

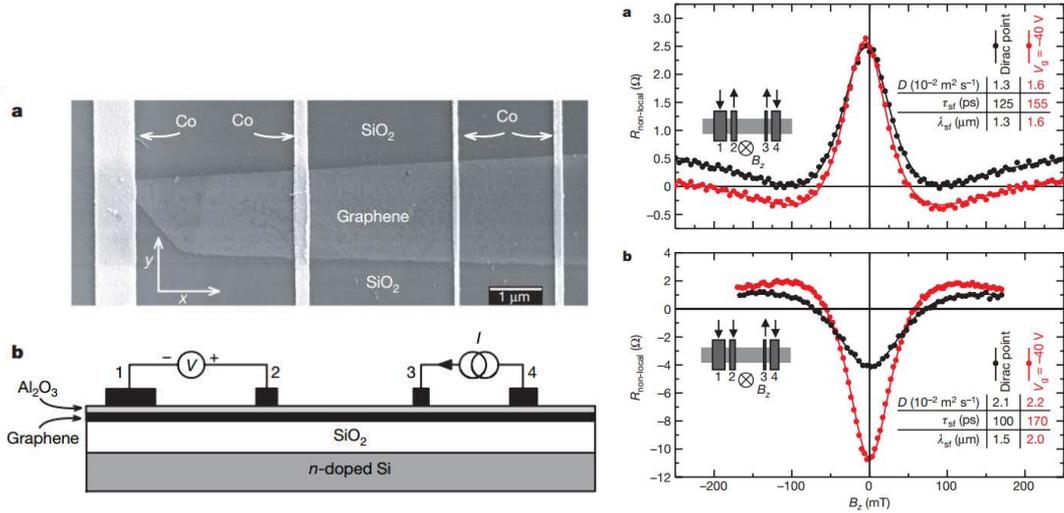


图 1-6: 左图: 单层石墨烯中的四端非局域自旋阀测量装置, 1-4 表示四个铁磁电极, 自旋极化从电极 3 中注入。右图: 利用 Hanle 效应测量得到的非局域磁阻信号, 上(下)图对应电极 2 和 3 中磁矩平行(反平行)。摘自文献 [138]。

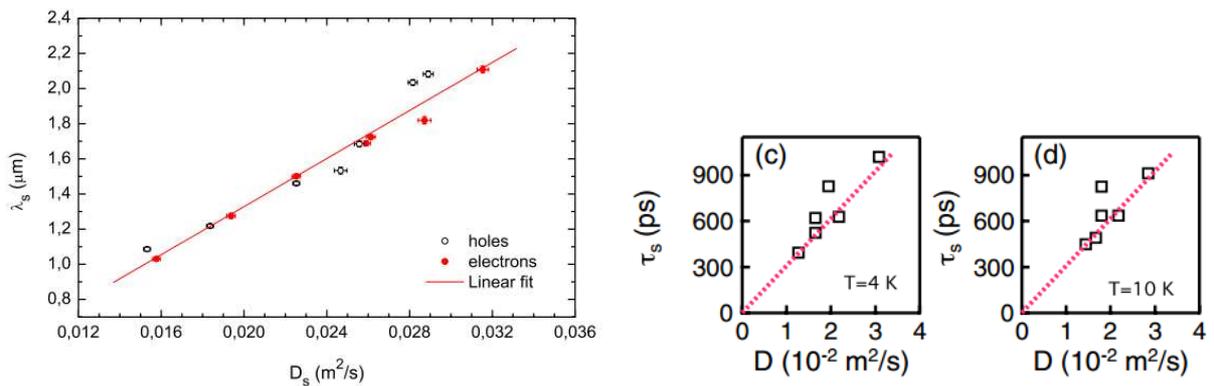


图 1-7: 左图: van Wees 小组在室温下通过改变载流子浓度测量得到的自旋扩散长度跟扩散系数之间的关系。摘自文献 [142]。右图(包括最右边两幅): Kawakami 小组在低温下调节电子浓度得到的自旋驰豫时间跟扩散系数的依赖关系。摘自文献 [147]。

我们按照自旋驰豫时间 τ_s 和动量散射时间 τ_p (或者扩散系数 D , $D \propto \tau_p$ [154]) 的关系将实验结果分成四类, 第一类中 τ_s 随着 τ_p 的增大而增大; 第二类中 τ_s 随着 τ_p 的增大而减小; 第三类中 τ_s 与 τ_p 呈现非单调的关系; 最后一类中 τ_s 对 τ_p 的变化不敏感。

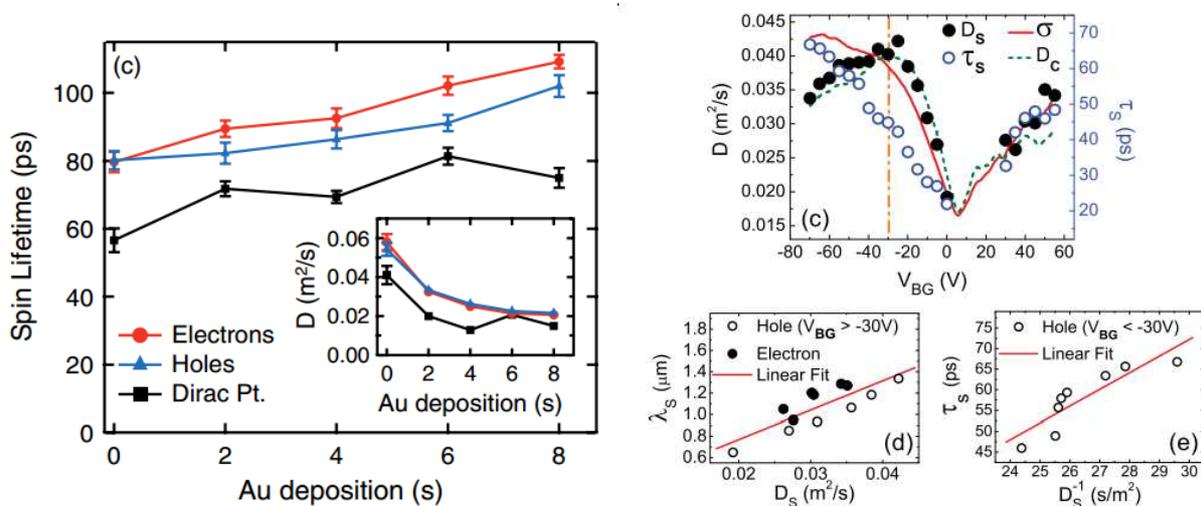


图 1-8: 左图: Kawakami 小组在固定温度 (低温) 和电子浓度的情况下观测得到的自旋弛豫时间和扩散系数 (见插图) 随表面化学掺金浓度的变化关系。摘自文献 [145]。右图 (包括右边三幅): Jo 等人在低温下测量了自旋弛豫时间和扩散系数随门电压的变化关系如上图所示。在下左 (下右) 给出了当门电压 $V_{BG} > -30 V$ ($V_{BG} < -30 V$) 时自旋扩散长度 (自旋弛豫时间) 跟扩散系数 (扩散系数的逆) 成线性关系。摘自文献 [165]。

需要指出的是大部分实验会根据 τ_s 和 τ_p 的关系来简单地判断占主导的自旋弛豫机制, 比如说把第一类归为 EY 机制占主导, 认为第二类中 DP 机制最重要等, 这种做法其实是没有依据的, 我们在前面讨论 DP 自旋弛豫机制的时候已经讲过无论在强散射或者弱散射区 DP 自旋弛豫时间既可能正比也可能反比于动量散射时间。

具体来看一下四类实验结果, 需要说明的是实验非常多我们不可能一一列举讨论, 这里只挑选一些例子作为代表。第一类实验结果 [142, 147] 如图 1-7 所示, van Wees 小组在室温下 (左图) [142] 和 Kawakami 小组在低温下 (右图) [147] 通过门电压调节载流子浓度都观测到了 τ_s 跟 τ_p 成线性关系。在第二类实验中我们以 Kawakami 小组 [145] 的一个实验为例, 他们在低温并固定电子浓度不变的情况下研究了表面化学掺金对体系的自旋弛豫时间以及扩散系数的影响。如图 1-8 左图所示, 随着掺金浓度的增大自旋弛豫时间变长但扩散系数却减小, 这表明自旋弛豫时间随动量散射时间的增大而变小。再来看第三类实验, Jo 等人 [165] 在低温下测量了自旋弛豫时间和扩散系数随门电压 (即载流子浓度) 的变化关系如图 1-8 右图中上图所示, 自旋弛豫时间随门电压是单调变化的而扩散系数却呈现出非单调的行为。具体地, 如图 1-8 右图中下左 (下右) 所示, 当门电压 $V_{BG} > -30 V$ ($V_{BG} < -30 V$) 时 $\tau_s \propto \tau_p$ (τ_p^{-1}), 这类实验结合了第一和第二类的特点。最后一类实验中自旋弛豫时间对动量散射时间不敏感, Kawakami 小组在两个不同的实验中都观测到了这个现象 [163, 164], 如图 1-9 所示。左图是在低温下固定电子浓度利用有机配合基束缚的纳米颗粒 Fe_2O_3 作为电荷库来调节动量散射强度 [163], 右图的实验条件为低温载流子浓度固定但可以调节表面掺的 Mg 原子浓度 [164]。以上实验中自旋弛豫时间跟动量散射时间之间这么丰富复杂的关系极大地激

发了相关的理论研究，我们将在下一小节中详细地加以讨论。

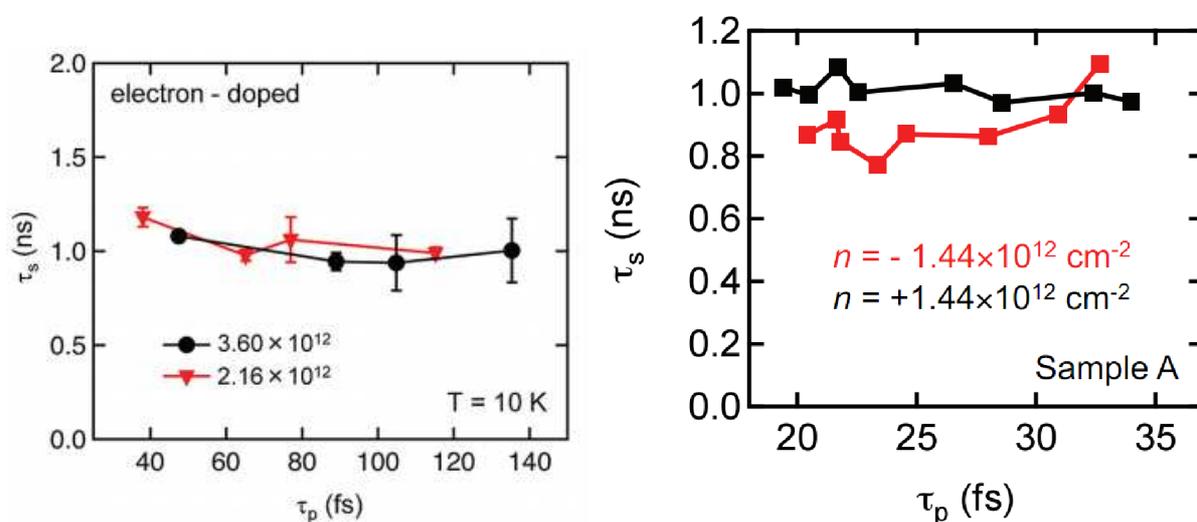


图 1-9: Kawakami 小组的两个实验。左图: 低温下固定电子浓度利用有机配合基束缚的纳米颗粒 Fe_2O_3 作为电荷库来调节动量散射强度但发现自旋弛豫时间对动量散射不敏感。摘自文献 [163]。右图: 低温下固定载流子浓度通过在表面掺 Mg 原子观测到自旋弛豫时间对动量散射时间不敏感。摘自文献 [164]。

在上面介绍的所有实验中，单层石墨烯都是生长在 SiO_2 衬底上的。其它衬底上的单层石墨烯中的自旋弛豫也有一些实验研究。Maassen 等人 [166] 利用非局域自旋阀结构下的 Hanle 效应测量了比 SiO_2 衬底更平整的 SiC 衬底上的单层石墨烯中的自旋弛豫时间，他们发现自旋弛豫时间在 ns 量级比 SiO_2 衬底上测到的典型值大一个量级左右。这反映了不同衬底对自旋弛豫的影响会很不一样， SiO_2 衬底比 SiC 衬底更容易加快单层石墨烯中的自旋弛豫。紧接着，Dlubak 等人 [167] 通过测量 SiC 衬底上的单层石墨烯中的磁阻效应得到了自旋扩散长度在 $100 \mu\text{m}$ 量级。根据这个自旋扩散长度和体系的平均自由程可以估算出自旋弛豫时间在 100 ns 量级，它要比所有非局域自旋阀结构下的 Hanle 效应测量得到的自旋弛豫时间至少大两个量级。这种利用磁阻效应估算得到自旋弛豫时间的方法还有待实验进一步检验。之后，Zomer 等人 [168] 研究了比 SiC 衬底更平整的 BN 衬底上的单层石墨烯中的自旋弛豫，他们利用 Hanle 效应测量得到的自旋弛豫时间跟 SiO_2 衬底上测到的典型值在一个量级， BN 衬底虽然提高了体系的迁移率但没能相应地延长自旋弛豫时间。通过比较不同衬底中的实验，我们只能得出以下结论即 SiO_2 和 BN 衬底比 SiC 衬底更能加快单层石墨烯中的自旋弛豫，背后的物理原因还有待实验和理论研究。此外，Guimarães 等人 [169] 还测量了悬挂的单层石墨烯中的自旋弛豫，他们发现自旋弛豫时间跟 SiO_2 衬底中的差不多。这是因为电极的存在使得石墨烯的一部分不可避免地跟衬底（实验中选用的是 SiO_2 ）接触而这部分在衬底上的石墨烯中的自旋弛豫可能占据主导地位。

1.2.2.3 实验结果的各种可能的理论解释

在上一小节我们总结了实验中出现的关于自旋弛豫时间跟动量散射时间之间的各种依赖关系，这些不同的依赖关系反映的是不同实验之间的差异。除此之外，实验跟理论之间也存在着巨大差异，目前所有实验测量得到的自旋弛豫时间都比理论预期的来得远小。为了搞清楚这些差异背后的物理原因人们提出了各种可能的理论解释。这里我们主要讨论四种自旋弛豫机制，第一种是由 Rashba 自旋轨道耦合导致的 DP 机制，第二种是由随机 Rashba 自旋轨道耦合的空间涨落引起的自旋翻转散射导致的自旋弛豫机制，第三种也属于 DP 机制的范畴，自旋轨道耦合除了 Rashba 自旋轨道耦合外还包含在两个能谷中有效磁场大小相同方向相反的类 Zeeman 项，这个类 Zeeman 项跟谷间电子-声子散射一起会打开一个谷间自旋弛豫通道，这个谷间自旋弛豫通道在第一种机制中是不存在的。最后一种是由局域磁矩引起的自旋翻转散射导致的自旋弛豫。特别地，当散射处于共振的时候会被极大地增强从而使得自旋弛豫时间大幅度减小。

我们先来看一下第一种自旋弛豫机制即 Rashba 自旋轨道耦合导致的 DP 机制 [155]。衬底和表面附着原子会改变碳原子的轨道杂化由 sp^2 变为 sp^3 从而导致 Rashba 自旋轨道耦合，由于附着原子是随机分布的，因此 Rashba 自旋轨道耦合强度是空间依赖的，具体形式为 [125, 127]

$$H_{so} = \lambda(\mathbf{r})(\mu\sigma_x s_y - \sigma_y s_x). \quad (1.13)$$

这里 $\mu = \pm 1$ 表示的是 K 和 K' 两个能谷， $\boldsymbol{\sigma}$ 和 \mathbf{s} 分别为赝自旋空间和自旋空间的 Pauli 矩阵。Zhang 和 Wu 假设空间依赖的 Rashba 自旋轨道耦合强度为 [155]

$$\lambda(\mathbf{r}) = \lambda_0^i + \sum_{n=1}^{N_i^a} \delta_n e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{R}_n|^2/2\xi^2}. \quad (1.14)$$

第一项是来自衬底的贡献，没有考虑位置依赖关系。第二项是由附着原子引起的，原子总数为 N_i^a ，每个附着原子贡献的强度假设具有高斯形式， \mathbf{R}_n ， δ_n 和 ξ 分别表示附着原子位置，高斯线形的峰值和附着原子间的关联长度。 $\lambda(\mathbf{r})$ 的平均值为 $\lambda_0 \equiv \langle \lambda(\mathbf{r}) \rangle = \lambda_0^i + \lambda_0^a$ ，其中附着原子的贡献为 $\lambda_0^a = c_2 n_i^a$ ， n_i^a 是附着原子的面浓度。Zhang 和 Wu 利用弹性散射近似在解析上推导了位置平均后的 Rashba 自旋轨道耦合导致的 DP 自旋弛豫率 Γ_{DP} ，具体形式为

$$\Gamma_{DP} = \frac{4(\lambda_0^i + c_2 n_i^a)^2}{\tau_{p,i}^{-1}(k_f) + c_1 n_i^a}, \quad (1.15)$$

其中 $c_1 n_i^a$ 表示电子-附着原子的散射而 $\tau_{p,i}^{-1}(k_f)$ 则表示其它散射的贡献。从这里我们可以看出 Γ_{DP} 跟 n_i^a 之间存在非常复杂的依赖关系，在不同的条件下， Γ_{DP} 可以随 n_i^a 的增大而变小或者变大，甚至还有可能出现非单调的关系。利用这些关系可以很好地解释一些跟附着原子相关的实验比如说在上一小节提到的第二类实验结果，但也有

些实验是解释不了的比如说第四类实验（自旋弛豫时间对动量散射不敏感）。我们再来看一下 Γ_{DP} 跟电子浓度的关系。电子浓度有两方面的影响，一方面电子浓度增大散射变弱 Γ_{DP} 变大，另一方面电子浓度变大附着原子贡献的自旋轨道耦合变小导致 Γ_{DP} 变小，这两者的竞争使得 Γ_{DP} 随电子浓度可以单调（增大或减小）也可能非单调变化 [155]。这可以解释很多通过门电压改变电子浓度的实验比如说第一类跟第三类实验中的例子。

Zhang 和 Wu 发现空间依赖的 Rashba 自旋轨道耦合除了可以导致 DP 自旋弛豫外，它的空间涨落还会导致自旋翻转散射从而引起自旋弛豫 [155]。他们发现该自旋弛豫机制具有以下几个特点，首先自旋弛豫率跟附着原子浓度成正比，跟电子-附着原子以外的散射无关，其次自旋弛豫率随电子的浓度的增大可以变大、减小或者出现非单调的行为。根据第一个特点该机制可以解释第四类实验即在电子浓度固定的时候自旋弛豫时间对动量散射时间不敏感，这是因为自旋弛豫中附着原子的贡献占主导地位而动量散射是由电子-附着原子散射以外的其它散射控制的。但是第一个特点解释不了第二类实验中电子浓度固定自旋弛豫率随附着原子浓度增大而减小的现象。从第二个特点可知该自旋弛豫机制可能解释第一类和第三类中自旋弛豫时间随电子浓度改变而出现的单调非单调行为。

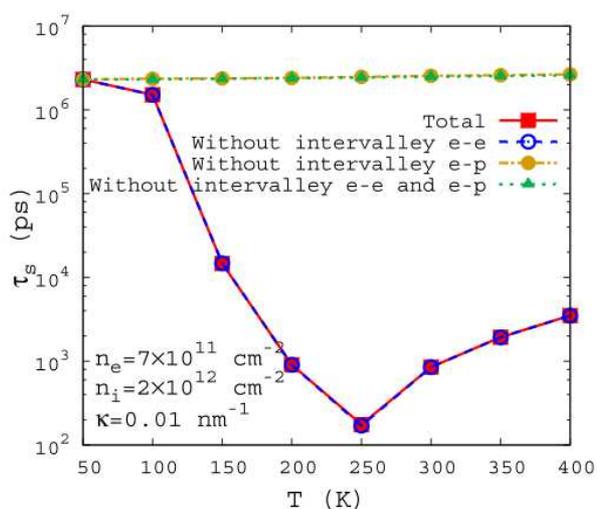


图 1-10: 包含不同谷间散射的情况下，自旋弛豫时间随温度的变化。e-e 和 e-p 分别表示电子-电子库仑和电子-声子散射。摘自文献 [158]。

上面两种机制是由衬底或表面附着原子引起的，而第三种机制是由结构弯曲导致的自旋弛豫机制，虽然它也属于 DP 机制的范畴但是跟由 Rashba 自旋轨道耦合诱导的 DP 自旋弛豫是有明显区别的。Jeong 等人指出在弯曲的单层石墨烯中除了 Rashba 自旋轨道耦合外还有一个额外的自旋轨道耦合项（我们称之为类 Zeeman 项），该类 Zeeman 项在两个能谷中的有效磁场大小相同方向相反 [157]。Zhang 等人 [158]发现该类 Zeeman 项跟谷间电子-声子散射一起可以打开一个谷间自旋弛豫通道。当谷间电

声散射处于弱（强）散射区的时候，谷间自旋弛豫时间随谷间散射的增强而减小（变大），在强弱散射区过渡的地方谷间自旋弛豫时间达到最小。具体来说，如图 1-10 所示，Zhang 等人计算了包含不同谷间散射情况下自旋弛豫时间随温度的变化，他们发现当温度较高的时候谷间电子-声子散射占主导地位，另外自旋弛豫时间随温度的升高先减小后增大，这是因为温度升高的时候谷间电子-声子散射从弱散射区变到强散射区，自旋弛豫时间最小的时候约为几百皮秒可以跟实验测量值比拟。需要说明的是自旋弛豫时间跟实验值可比拟的时候所需要的自旋轨道耦合强度为 μeV 量级，要比前面两种机制中的 meV 量级来的远小。另外需要注意的是，这里讨论的谷间自旋弛豫机制只有在电子的平均自由程小于弯曲尺度的样品中才起作用，在迁移率很高的样品中该机制可以不用考虑。最近，我们发现跟单层石墨烯中依靠弯曲这个外在因素不同，谷间自旋弛豫通道能够自然地存在于一些表面平整的材料中比如双层石墨烯 [170]、单层 MoS_2 [105, 171] 以及双层 WSe_2 [172] 等并对这些材料的自旋弛豫起着非常重要的作用。有关这方面的研究会在今后的章节中详细地讨论。

我们再来讲一下局域磁矩对自旋弛豫的影响。在单层石墨烯中出现局域磁矩并不显然因为它没有 d 电子或者 f 电子。目前有一些实验跟理论工作报告了单层石墨烯中有可能存在局域磁矩，可能的来源包括空位 [173–175] 以及表面附着原子 [173, 175] 等。最近，Fabian 小组发现局域磁矩引起的自旋翻转散射可以导致自旋弛豫，尤其当散射处于共振的时候会被很大的加强继而加快自旋弛豫 [176]。具体来说，他们通过在单层石墨烯表面附着氢原子产生局域磁矩，该局域磁矩引起的自旋弛豫时间在 100 ps 左右可以跟实验测量值相比拟。之后，他们将这个自旋弛豫机制应用到双层石墨烯中发现计算得到的自旋弛豫时间跟实验测量结果也很接近 [177]。

最后，我们来做一个简单的小结。在第四类实验结果出来之前，我们认为由 Rashba 自旋轨道耦合导致的 DP 机制是主要的自旋弛豫机制，因为它可以解释所有其它三类实验结果。但是第四类实验结果明显不支持该弛豫机制，它支持的是由随机 Rashba 自旋轨道耦合的空间涨落引起的自旋翻转散射导致的自旋弛豫机制。因此，目前不同的实验现象很难用一个统一的自旋弛豫机制来解释，单层石墨烯中占主导的自旋弛豫机制仍然没有定论，这背后的原因在于单层石墨烯的自旋弛豫很容易被各种可能的外在因素比如衬底、附着原子、弯曲以及电极接触等影响。如果不能很好地解决这些问题单层石墨烯的应用（至少在自旋电子学方面）就会很困难。

1.2.2.4 铁磁电极接触对自旋弛豫的影响

在本小节我们单独讨论一下铁磁电极接触对单层石墨烯中自旋弛豫的影响。不同于衬底、附着原子、弯曲等外在因素，铁磁电极是电学测量方法中必不可少的，自旋极化的注入和自旋信号的探测都得依靠铁磁电极。当接触电阻比较小的时候，注入的电子自旋很有可能扩散回流到铁磁电极 [143]，这时候我们用 Hanle 线形 [公式 (1.12)] 去拟合非局域磁阻信号得到的自旋弛豫时间就会受到自旋回流的影响。为了抑制自旋回流效应，实验上往往在铁磁电极和单层石墨烯之间插入透穿电阻很高的绝缘层比如 Al_2O_3 或

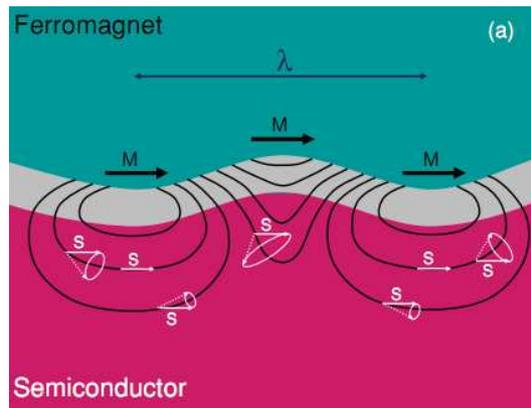


图 1-11: 铁磁电极在界面处产生的空间非均匀的漏场示意图。摘自文献 [178]。

者 MgO。此外，铁磁电极还能引起自旋弛豫，比如说在铁磁电极跟单层石墨烯界面存在自旋翻转散射，铁磁电极还可以产生空间上非均匀的漏磁场如图 1-11 所示，这些漏磁场会使电子自旋在铁磁电极附近进动从而导致自旋弛豫 [178]。为了尽可能地减小铁磁电极对自旋弛豫的影响，实验中需要使铁磁电极之间的距离远大于单层石墨烯中的自旋扩散长度，另外还要提高电极接触的质量。需要指出的是，如果铁磁电极接触在自旋弛豫过程中占主导地位，那么自旋弛豫时间必然对动量散射时间不敏感，这可以解释在章节 1.2.2.2 中提到的第四类实验结果，但不能解释其它三类结果。有关铁磁电极接触对自旋弛豫的影响还需要实验进一步研究。

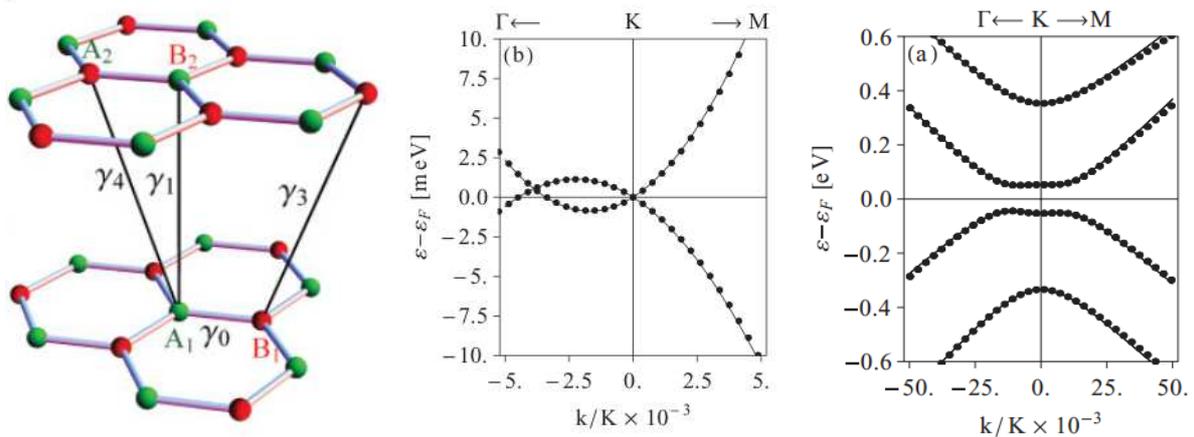


图 1-12: 左图: A-B 堆叠的双层石墨烯的晶格示意图, γ_0 和 $\gamma_{1,3,4}$ 分别表示电子的层内和层间跃迁。右边两幅图表示的是双层石墨烯在 K 点附近的能带结构, 其中中图 (右图) 对应的是没有 (有) 垂直于表面的外加电场的情况。摘自文献 [179]。

1.2.3 双层石墨烯中的自旋弛豫

双层石墨烯是由两个单层石墨烯堆叠而成，其晶格结构如图 1-12 左图所示，电子除了可以在层内跃迁 (γ_0) 外还能在层间跃迁 ($\gamma_{1,3,4}$)。Fabian 小组 [179] 从第一性原理出发计算了双层石墨烯的能带结构，在没有垂直于表面的外加电场的时候（见图 1-12 中图），双层石墨烯的能带跟单层的一样都是无能隙的但是两者在 Dirac 点附近的能带关系很不一样，双层中表现为抛物的行为不同于单层中的线性关系。当有垂直的外加电场存在的时候，双层石墨烯的能带中打开了一个能隙如图 1-12 右图所示，能隙大小可以由外加电场来调节，这跟单层石墨烯中外加电场不能打开能隙的情况完全不同。此外，外加电场还能在双层石墨烯中引起自旋劈裂 [179]，自旋劈裂对应的自旋轨道耦合形式跟单层中很不一样，简单来说，双层石墨烯的自旋轨道耦合多了平面外的有效磁场项，该有效磁场的主导项在两个能谷 (K 和 K') 中大小相等方向相反，会对自旋弛豫起着非常重要的作用，我们会在第 4 章中详细讨论。双层石墨烯中的这些独特的性质吸引了一些人的关注，这里我们主要谈谈自旋弛豫方面的工作。最近，双层石墨烯中自旋弛豫的实验跟理论研究有了一些报道 [147, 148, 180–182]，在本小节中，我们将对这些工作做个简单总结。

1.2.3.1 双层石墨烯中自旋弛豫的实验研究

实验上报道在 SiO_2 衬底上的 [147, 148, 180] 和自由悬空的 [182] 双层石墨烯中自旋弛豫时间都在 0.01-1 ns。虽然不同实验中测量到的自旋弛豫时间量级比较接近，但是自旋弛豫时间的温度浓度依赖关系却很不一样。Yang 等人 [180] 发现自旋弛豫时间对温度不敏感（见图 1-13 左上）而 Han 和 Kawakami [147] 却观测到自旋弛豫时间随着温度升高会明显变小（见图 1-13 右上）。在低温下，这两个实验中自旋弛豫时间都随浓度增加而减小。但是在室温下，Yang 等人发现随着浓度增加自旋弛豫时间也变大（见图 1-13 左下）但是 Han 和 Kawakami 却测量到自旋弛豫时间对浓度不敏感（见图 1-13 右下）。上述两个实验中双层石墨烯是通过力学解离的方法得到的，除此之外，Avsar 等人 [148] 利用化学气相沉积法也得到了双层石墨烯，在这种方法得到的双层石墨烯中，他们发现自旋弛豫时间在量级和对温度浓度的依赖上都跟 Yang 等人的实验比较接近。目前双层石墨烯中的自旋弛豫在为数不多的实验中已经出现争议，这跟单层石墨烯中的情况很类似，为了搞清楚这些问题需要更多的实验参与进来。

1.2.3.2 双层石墨烯中自旋弛豫的理论研究

为了解释最近实验中报道的双层石墨烯中的自旋弛豫行为，Diez 和 Burkard [181] 计算了在 DP 机制下由长程电子-杂质散射导致的自旋弛豫时间，他们宣称跟 Yang 等人 [180] 的实验结果很吻合。实际上，他们的理论工作中存在很多不严谨的地方。他们用到的有效自旋轨道耦合是由层间偏压引起的电势跟本征自旋轨道耦合导致的，实际

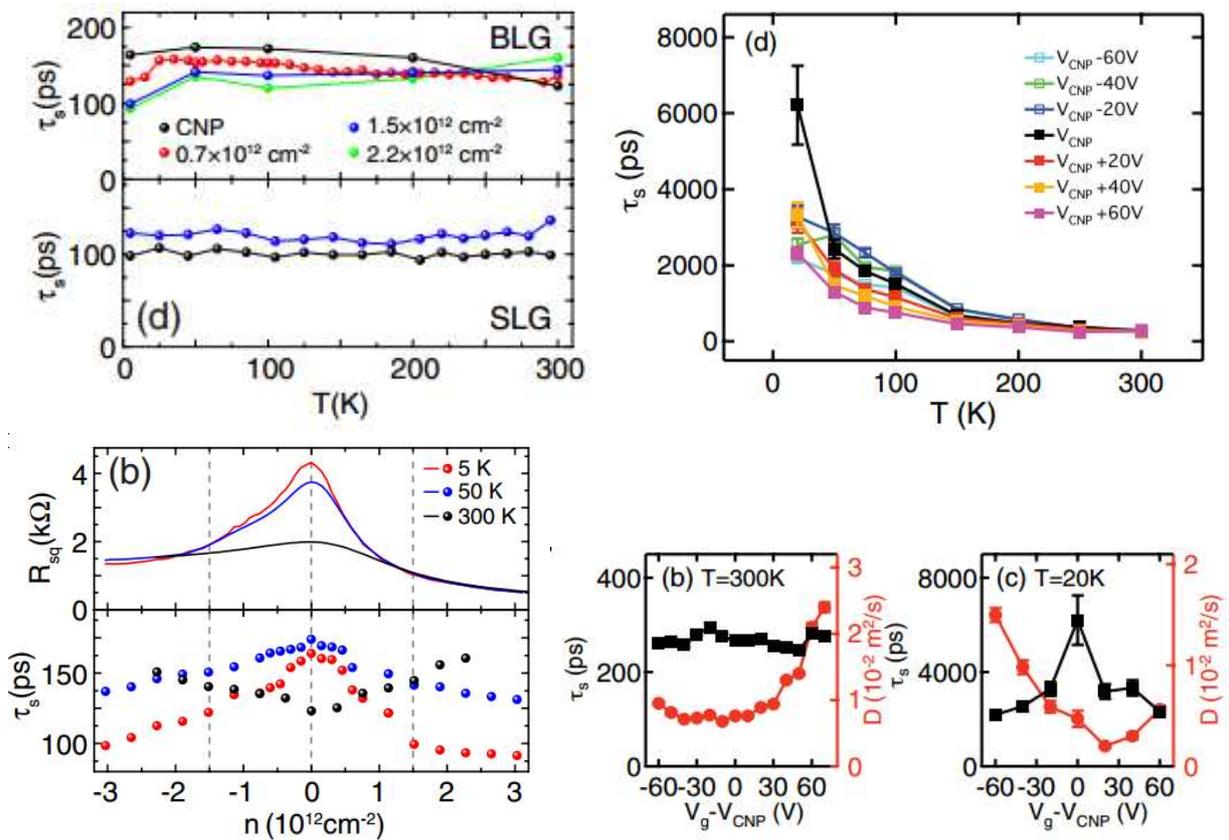


图 1-13: 实验上测到的双层石墨烯中自旋弛豫时间跟温度（上半部分）和浓度（下半部分）的依赖关系。左上和左下是 Yang 等人的实验结果。摘自文献 [180]。右上和右下（包括最右边两幅）为 Han 和 Kawakami 的实验数据。摘自文献 [147]。

上，层间偏压除了引起电势外还会破坏体系的结构反演对称从而诱导出本征自旋轨道耦合之外更多的自旋轨道耦合项，在他们的工作中没有考虑这些额外项的贡献。另外，他们还忽略了有效自旋轨道耦合中的平面外分量以及在半导体跟单层石墨烯中对自旋弛豫都起着很重要作用的电子-声子和电子-电子库仑散射 [7, 104]。最近，我们研究了双层石墨烯中由层间偏压引起的完整的自旋轨道耦合以及所有相关的散射包括电子-电子库仑散射、谷内谷间电子-声子散射和长短程电子-杂质散射共同导致的 DP 自旋弛豫 [170]。我们发现自旋轨道耦合的平面外分量的主导项在两个能谷中的有效磁场大小相同方向相反，提供了谷间非均匀扩展。该非均匀扩展跟谷间散射（包括谷间电子-声子和谷间短程电子-杂质散射）一起可以打开一个谷间自旋弛豫通道，这个通道对双层石墨烯中的自旋弛豫起着非常重要的作用。在不考虑短程电子-杂质散射的时候，我们发现平面内自旋弛豫时间随温度升高先减小后变大，自旋弛豫时间最小可达到百皮秒量级，这跟实验结果可比拟。此外，我们还跟现有实验中自旋弛豫时间的温度浓度依赖关系做了非常详细的比较。这里需要指出的是谷间自旋弛豫通道在单层 MoS_2 中同样存在并在自旋弛豫过程中扮演着很重要的角色 [105, 171]。我们会在后面的章节具体介绍这些相关工作。

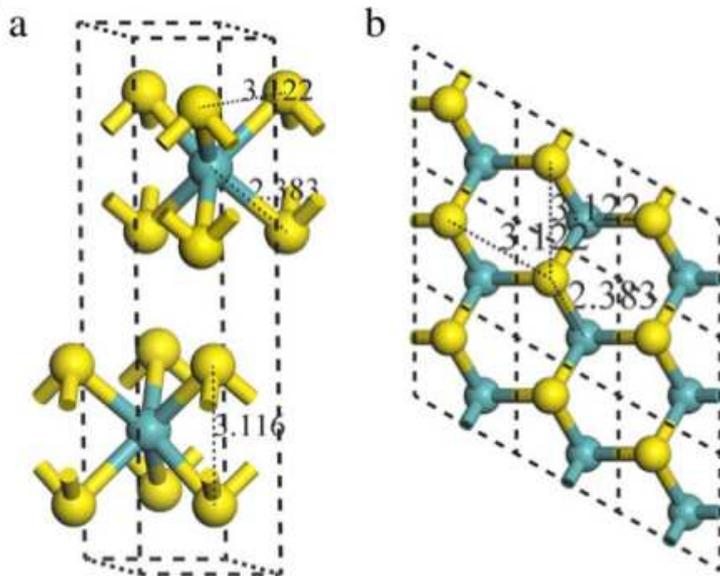


图 1-14: (a) MX_2 块体材料的原胞的侧视图，原胞中包括两个 M 原子（蓝色）和四个 X 原子（黄色）。(b) 单层 MX_2 的俯视图，跟单层石墨烯的晶格结构类似。摘自文献 [183]。

1.2.4 单层 MoS_2 中的自旋弛豫

跟石墨类似，过渡金属硫属化合物 (MX_2 , $\text{M}=\text{Mo}, \text{W}$; $\text{X}=\text{S}, \text{Se}$) 也是层状材料如图 1-14 (a) 所示，层与层之间是通过弱的范德瓦尔斯相互作用耦合在一起。可以通过力学剥离或者化学气相沉积法将这些块体材料变成几层甚至单层样品 [184–187]。需要说明的是这里的单层实际上包括三层，中间的是 M 原子（蓝色）上下两边为 X 原子（黄

色），这三层之间是通过很强的共价键联系在一起的很难被力学解离。俯视来看，这三层会投影到一个二维平面得到类似单层石墨烯的晶格结构如图 1-14 (b) 所示，但跟单层石墨烯不同的是单层 MX_2 中原胞内的两个原子不等价，这个不等价会破坏单层 MX_2 中的空间反演对称性。

最近几年，单层 MX_2 无论在理论还是实验上都受到了极大关注，因为它具有很多特别的性质 [118–122, 183, 187–216]。我们先来看看单层 MX_2 的能带结构（以 MoS_2 为例），作为比较我们同时给出了双层和块体材料的结果如图 1-15 所示，可以看出双层和块体材料的能隙都是间接的（导带底和价带顶不在同一动量处）而单层 MoS_2 在不等价的 K (K') 点处有一个直接的能隙，具体来说，从块体材料变到双层的时候导带底已经移到了 K 点但价带顶还在 Γ 点，从双层进一步到单层的时候价带顶也会移到 K 点。需要指出的是不同计算方法给出的单层 MoS_2 中的能隙大小很不一样，用 DFT 计算得到的能隙在 1.8–1.9 eV [183, 199] 而利用 GW 方法得到的能隙在 2.8 eV 左右 [200, 207]，根据半导体中的经验 DFT 往往会低估体系的能隙而 GW 方法能更好地描述能带结构。另外，实验上利用单层 MoS_2 具有能隙的特点已经做出了基于单层 MoS_2 的二维场效应管，该场效应管具有很大的开关电流比 [187, 203]。

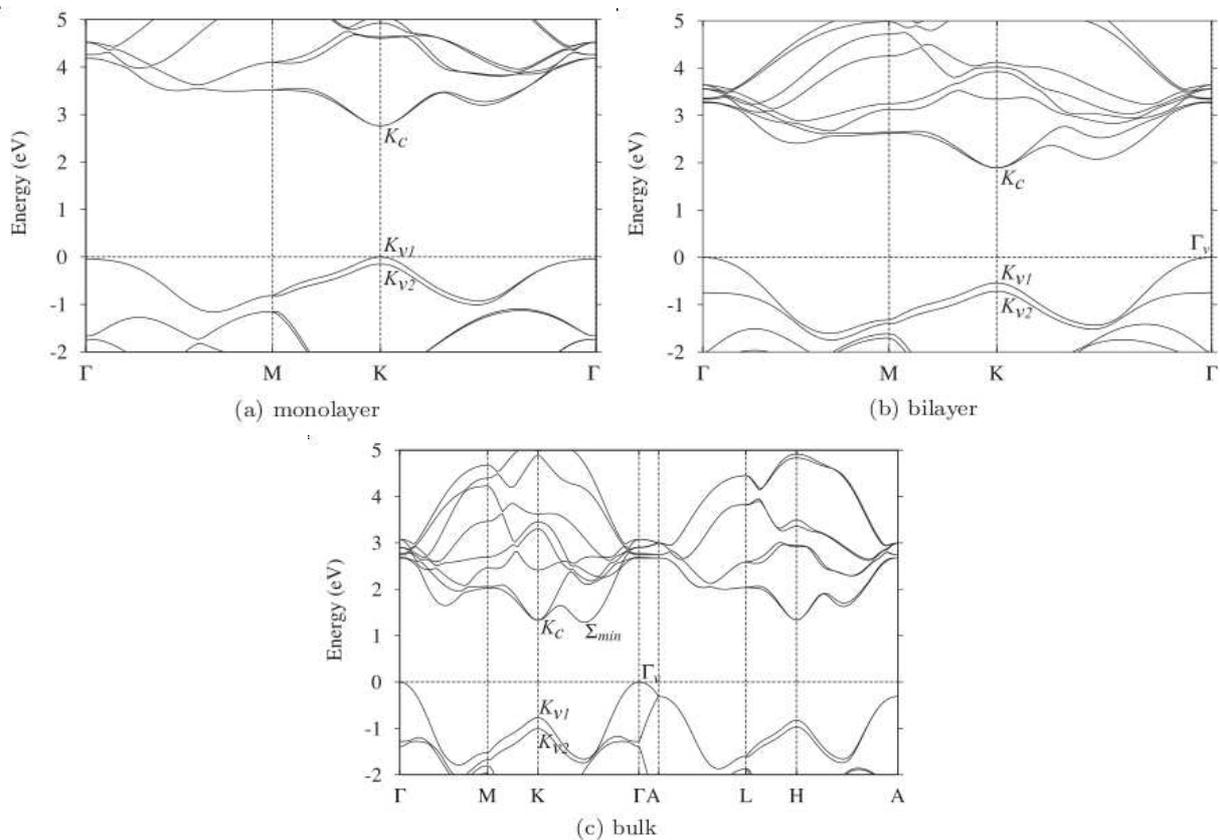


图 1-15: MoS_2 的能带结构。(a) 单层；(b) 双层；(c) 块体材料。摘自文献 [200]。

除了有直接的能隙外，单层 MX_2 中空间反演对称破缺还会导致导带和价带的自

旋劈裂 [183, 191, 197, 200, 206, 209, 213, 214]。图 1-16 中给出了 MoS_2 、 MoSe_2 、 WS_2 以及 WSe_2 的能带结构，我们发现在不考虑自旋轨道耦合相互作用的时候能带都是自旋简并的如红色点线所示。当引入自旋轨道耦合相互作用后，四种材料的价带顶 (K 和 K') 附近都出现了非常明显的自旋劈裂如图中黑色实线所示，自旋劈裂的大小在 10^2 meV 量级，通过对比可以发现 MSe_2 的自旋劈裂比 MS_2 的略大一些而 WX_2 的自旋劈裂比 MoX_2 的来得远大，这是因为原子越重自旋轨道相互作用也就越大。实际上导带底附近也会有自旋劈裂但要比价带顶附近的小很多，在图 1-16 中只能分辨出 WX_2 的自旋劈裂而 MoX_2 的已经小到看不清楚了 (meV 量级)。这些自旋劈裂对应的自旋轨道耦合形式跟双层石墨烯中平面外的分量很类似，两个能谷中的有效磁场大小相等方向相反，可能会对自旋弛豫起着非常重要的作用 [171]。

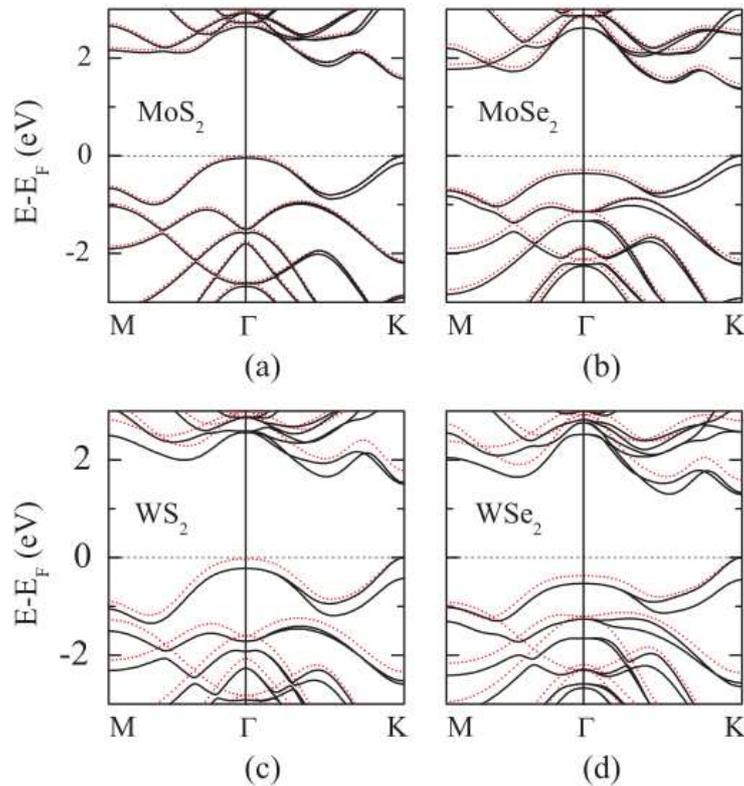


图 1-16: 单层 MX_2 的能带结构, (a) MoS_2 ; (b) MoSe_2 ; (c) WS_2 ; (d) WSe_2 。黑色实线和红色点线分别表示考虑了和没有考虑自旋轨道相互作用的情况。摘自文献 [191]。

最近，单层 MoS_2 中 K (K') 点附近最低导带电子的自旋弛豫的理论研究有了一些报道。Ochoa 和 Roldán [209]研究了单层 MoS_2 中的谷内自旋弛豫。他们计算了由 Rashba 自旋轨道耦合导致的平面外自旋弛豫，其中 Rashba 自旋轨道耦合是通过施加平面外的电场得到的。需要指出的是，在没有平面外的电场的时候，DP 机制下的平面外自旋弛豫是被严格禁戒的，因为体系中本征的自旋轨道耦合的有效磁场沿着平面外方向，这是由体系中具有的镜面反演对称性决定的。当考虑进平面外电场后，镜面反演对称性会被破坏，自旋轨道耦合的有效磁场可以有平面内分量从而引起平面外自旋弛

豫。他们还指出本征自旋轨道耦合和电子-杂质散射可以导致 DP 机制下的平面内自旋驰豫，但是这个自旋驰豫过程实际上是不存在的 [7]。电子-杂质散射是弹性散射只能发生在等能面上，体系的能谱为简单的抛物谱，表明散射前后动量的大小不变，而在他们的工作中本征自旋轨道耦合只依赖于动量的大小，此时在电子-杂质散射的过程中电子始终感受不到本征自旋轨道耦合提供的非均匀扩展，因此 DP 自旋驰豫不能发生。这种特殊的自旋轨道耦合在非弹性散射比如说电子-声子以及电子-电子库仑散射的作用下才能导致平面内自旋驰豫，但 Ochoa 和 Roldán 并没有考虑这些散射。另外，他们在计算的过程中忽略了谷指标以及相应的谷间自旋驰豫过程。实际上，包含谷指标的本征的自旋轨道耦合项是一个类 Zeeman 项即在两个谷中的有效磁场大小相等方向相反，它可以跟谷间电子-声子散射一起打开 DP 机制下的谷间自旋驰豫通道，这个谷间驰豫通道对弯曲的单层石墨烯 [158]和平整的双层石墨烯 [170]中的自旋驰豫都起着非常重要的作用。

我们考虑了完整的自旋轨道耦合形式以及所有相关的散射研究了单层 MoS_2 中最低导带电子的自旋驰豫 [105, 171]。我们先计算了单层 MoS_2 中 DP 机制下的谷间自旋驰豫过程 [171]，谷间自旋驰豫是由类 Zeeman 项和谷间电子-声子散射导致的，这跟之前讲过的弯曲的单层石墨烯 [158]和平整的双层石墨烯 [170]中的情况一样。谷间电子-声子散射在我们研究的参数范围内始终处于弱散射区，这使得平面内自旋驰豫时间随温度的升高而单调减小，而在单双层石墨烯中谷间电子-声子散射可以经历强弱散射的变化使得自旋驰豫时间随温度非单调变化，这种差异出现的物理原因在于单层 MoS_2 中的自旋轨道耦合强度在 meV 量级远大于石墨烯中的 μeV 量级。此外，我们还讨论了自旋驰豫对电子浓度和初始自旋极化的依赖。这里我们考虑的本征自旋轨道耦合是动量无关的，因而谷内 DP 自旋驰豫过程是被禁戒的，实际上 Rostami 等人 [212]最近的工作表明本征自旋轨道耦合是可以有动量依赖的。于是，我们从动量依赖的本征自旋轨道耦合出发计算了单层 MoS_2 中 DP 机制下的谷内自旋驰豫过程 [105]并与谷间自旋驰豫过程做了详细的比较。我们发现在低温下谷内过程更重要但在温度较高的时候谷间过程占据主导地位，当温度介于两者之间的时候随着电子浓度的增加自旋驰豫的主导过程由谷间变到谷内。此外，在谷内过程中电子-杂质散射的贡献可以忽略而电子-电子库仑散射始终占据主导地位，这跟半导体 [7]和石墨烯 [104, 170]中的情况很不一样。我们还计算了 EY 机制下的自旋驰豫，但跟 DP 机制的相比可以忽略不计。我们会在后面的章节中详细讨论一下这两个工作。

1.3 自旋输运

除了时间域的自旋驰豫外，空间域的自旋输运也是对自旋电子学器件的实现起着非常重要作用的一个物理过程，它研究的是空间非均匀的自旋信号如何在实空间扩散或者在外加电场驱动下漂移。目前来说自旋输运主要是借助漂移-扩散模型或空间输运中的非均匀扩展来理解，在本小节我们先讨论一下这两个框架，然后对它们的适用性做个简

单的小结。

1.3.1 漂移-扩散模型

当外加驱动电场 \mathbf{E} 和外加磁场 \mathbf{B} 都存在的时候，漂移-扩散模型可以表示为 [6, 7]

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = \mu \mathbf{E} \cdot \nabla \mathbf{S} + D \nabla^2 \mathbf{S} - \frac{\mathbf{S}}{\tau_s} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{S}, \quad (1.16)$$

其中 \mathbf{S} 是自旋极化矢量； μ 和 D 分别表示迁移率和扩散系数，这里我们假设它们对自旋的依赖很弱； τ_s 为自旋驰豫时间； $\boldsymbol{\omega} = g\mu_B \mathbf{B}$ 。

我们先考虑只有外加电场的情况即忽略方程中的最后一项。考虑初始自旋极化为 z 方向自旋输运沿着 x 方向，在稳态下利用边界条件 $\mathbf{S}(x = +\infty) = 0$ ，我们很容易得到上面方程的解 $S_z(x) = S_z(0)e^{-x/l_s}$ ， l_s 为自旋输运长度满足以下关系 [7]

$$l_s = \left[\sqrt{\left(\frac{\mu E}{2D}\right)^2 + \frac{1}{D\tau_s}} + \frac{\mu E}{2D} \right]^{-1}. \quad (1.17)$$

特别地，在没有外加电场的时候，

$$l_s = \sqrt{D\tau_s}, \quad (1.18)$$

这个公式被很多文献用来计算自旋扩散长度 [6, 38, 39, 217]。

接下来我们考虑只有外磁场的情况，以自旋输运实验中常用的 Hanle 效应测量为例来讨论一下。假设注入的自旋极化为 y 方向沿着 x 方向输运，外加磁场沿着 z 方向与注入的自旋极化方向垂直，在稳态下利用边界条件 $S_y(x = +\infty) = 0$ 可以解得

$$S_y(x) \propto \int_0^\infty dt \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-\frac{t}{\tau_s} - \frac{x^2}{4Dt}} \cos(\omega t), \quad (1.19)$$

这就是 Hanle 线形 [公式 (1.12)] 的由来。当外加电场和磁场同时存在的时候，情况比较复杂，可以参考一些综述文献 [6, 7]，这里不予讨论。

1.3.2 空间输运中的非均匀扩展

在漂移-扩散模型中自旋进动项是由可能的外加磁场提供的，实际上在空间反演对称破缺的体系中自旋轨道耦合也能引起电子自旋的进动，但是漂移-扩散模型中并没有考虑这一项。Wu 等人完整地考虑了在空间输运过程中的自旋进动项，他们发现当磁场

和自旋轨道耦合都在的时候，自旋在空间的进动频率为 [7]

$$\omega_{\mathbf{k}} = \frac{\Omega(\mathbf{k}) + g\mu_B\mathbf{B}}{\partial_{k_x}\epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (1.20)$$

这里我们假设自旋极化沿着 x 方向输运， $\Omega(\mathbf{k})$ 是自旋轨道耦合提供的有效磁场， $\partial_{k_x}\epsilon_{\mathbf{k}}$ 为群速度，对最简单的抛物能谱而言，群速度正比于动量 k_x 。很明显，进动频率是动量依赖的，我们称之为空间输运中的非均匀扩展。这些非均匀扩展跟散射一起会使得自旋极化在输运的过程中发生不可逆的弛豫 [7]。最后需要强调的是均匀的磁场在空间域中可以直接提供非均匀扩展但在时间域中却不能，这是因为自旋在空间域的进动频率的分母 [见公式 (1.20)] 也就是群速度是动量依赖的。

1.3.3 小结

我们简单总结一下漂移-扩散模型和空间输运中的非均匀扩展各自的适用性。当初始的自旋极化方向几乎平行于总的有效磁场（包括自旋轨道耦合和外加磁场）的时候，电子的自旋进动非常缓慢，此时自旋进动项可以不用考虑，自旋输运可以很好地用漂移-扩散模型来描述 [154, 218]，自旋扩散长度即为公式 (1.18)，其中自旋弛豫时间可以在时间域的自旋弛豫中得到。当初始的自旋极化方向几乎垂直于总的有效磁场的时候，自旋矢量会在总的有效磁场的作用下非常明显地进动，这时候自旋输运只能用总的有效磁场提供的非均匀扩展来描述。最近，Yu 和 Wu 在研究冷原子中自旋输运的时候非常详细地讨论了相关问题 [218]。

第二章 动力学自旋 Bloch 方程和自旋弛豫机制

在这一章，我们先介绍一下动力学自旋 Bloch 方程，然后从该方程出发讨论一下时间域的自旋弛豫和空间域的自旋输运。动力学自旋 Bloch 方程是 Wu 从光学 Bloch 方程推广而来的，即把光学 Bloch 方程中的导带价带自由度替换成电子自旋的两分量 [7]。利用该方程可以很好地研究各种系统中的自旋动力学行为，从维度的角度来说这些系统包括三维的块体材料、受限的量子阱量子线、新型的二维材料比如说单双层石墨烯以及拓扑绝缘体的表面态等，从对称性的角度来说这些系统包括中心反演对称的材料比如硅锗、中心反演对称破缺的材料以及结构反演对称破缺的体系等。动力学自旋 Bloch 方程具有以下几个主要特点，第一，它可以严格地包括所有相关的散射尤其是电子-电子库仑散射，多体的屏蔽效应以及库仑相互作用导致的 Hartree-Fock 自能；第二，它能够处理近平衡甚至远离平衡（比如说大的自旋极化、大的外电场等）的情况；第三，它可以同时考虑 DP、EY、BAP 机制对自旋弛豫的贡献并能很好地揭示这些机制之间的竞争关系。这些特点正是动力学自旋 Bloch 方程相比于之前很多文献中采用的单体方法的优势。迄今为止，基于动力学自旋 Bloch 方程的研究已经取得了很大的成功，除了可以很好地解释大量的实验结果外，一些理论预言也已经被实验证实 [7, 98, 106, 219]。

2.1 动力学自旋 Bloch 方程

利用非平衡格林函数方法，在广义的 Kadanoff-Baym 假定下，可以得到动力学自旋 Bloch 方程 [7]

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{coh}} + \partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{scat}} + \partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{drift}} + \partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{dif}}. \quad (2.1)$$

$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ 是位置 \mathbf{r} ，时刻 t 下的单粒子密度矩阵。对于单带体系且只考虑自旋自由度的情况， $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ 是一个 2×2 的矩阵，对角项代表自旋带的分布函数，非对角项对应自旋关联，对于 n 个带而言， $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ 则扩展为 $2n \times 2n$ 的矩阵。方程右边四项分别表示相干进动项、散射项、外加电场引起的驱动项以及空间扩散项。下面我们以 III-V 族半导体块体材料 [102] 和单层石墨烯 [104] 为例给出最低导带电子的动力学自旋 Bloch 方程的具体形式。

先来看 III-V 族半导体块体材料中的情况 [102]。 $\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{coh}}$ 表示的是由外加磁

场 \mathbf{B} 和自旋轨道耦合提供的有效磁场 $\mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}}$ 引起的相干进动项,

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{coh}} = -i[(g\mu_B \mathbf{B} + \mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \hat{\Sigma}_{\text{HF}}(\mathbf{k}), \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)] \quad (2.2)$$

这里 $[A, B] = AB - BA$ 是对易子, $\hat{\Sigma}_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}$ 表示电子-电子库仑相互作用引起的 Hartree-Fock 自能, 其中屏蔽的库仑势 $V_{\mathbf{q}} = V_{\mathbf{q}}^0 / \epsilon_{\mathbf{q}}$, $V_{\mathbf{q}}^0 = e^2 / (\epsilon_0 \kappa_0 q^2)$ 表示三维体系中裸的库仑势, $\epsilon_{\mathbf{q}}$ 代表静态屏蔽, 在无规相位近似 (random phase approximation, RPA) 下形式为

$$\epsilon_{\mathbf{q}} = 1 - V_{\mathbf{q}}^0 \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - f_{\mathbf{k}\sigma}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (2.3)$$

这里 $f_{\mathbf{k}\sigma}$ 表示密度矩阵的对角项, $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 代表能谱项这里为简单的抛物谱。

$\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{scat}}$ 代表散射项包括了所有相关的自旋守恒和自旋翻转散射, 具体为电子-杂质散射 $\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}|_{\text{ei}}$ 、电子-声子散射 $\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}|_{\text{ep}}$ 以及电子-电子库仑散射 $\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}|_{\text{ee}}$ 。这些散射项可以写成

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}|_{\text{ei}} = & -\pi \sum_{\mathbf{k}'} n_i Z_i^2 V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}}) \left(\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}^{\gt} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \right. \\ & \left. \times \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\lt} - \hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}^{\lt} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\gt} \right) + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}|_{\text{ep}} = & -\pi \sum_{\lambda, \pm, \mathbf{k}'} |M_{\lambda, \mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \delta(\pm \omega_{\lambda, \mathbf{k}-\mathbf{k}'} + \epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}}) \left(N_{\lambda, \mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\pm} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \right. \\ & \left. \times \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}^{\gt} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\lt} - N_{\lambda, \mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\mp} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}^{\lt} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\gt} \right) + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}|_{\text{ee}} = & -\pi \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}''} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{k}'}) \left[\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}^{\gt} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\lt} \right. \\ & \times \text{Tr} \left(\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}'', \mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{k}'} \hat{\rho}_{\mathbf{k}''}^{\lt} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}'', \mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{k}'} \hat{\rho}_{\mathbf{k}''}^{\gt} \right) - \hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}^{\lt} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\gt} \\ & \left. \times \text{Tr} \left(\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}'', \mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{k}'} \hat{\rho}_{\mathbf{k}''}^{\gt} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}'', \mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{k}'} \hat{\rho}_{\mathbf{k}''}^{\lt} \right) \right] + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (2.6)$$

在这些方程中, $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\lt} = \hat{\rho}_{\mathbf{k}}$, $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\gt} = \hat{1} - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}$, $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ 为导带价带间自旋混合, 是自旋翻转散射的来源, 这一项的存在使得上面所有散射项中既有自旋守恒又有自旋翻转散射, 特别地, 当 $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \hat{1}$ (即不考虑导带价带间自旋混合) 的时候, 上面所有的散射都变为自旋守恒散射。另外, 在电子-杂质散射项中 n_i 表示杂质浓度, Z_i 表示杂质电荷量; 在电子-声子散射项中 $|M_{\lambda, \mathbf{q}}|^2$ 是电子-声子散射的矩阵元, λ 代表不同的声子支包括声学 and 光学声子, $\omega_{\lambda, \mathbf{q}}$ 是声子能量, $N_{\lambda, \mathbf{q}}^{\pm} = N_{\lambda, \mathbf{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}$, 其中 $N_{\lambda, \mathbf{q}}$ 表示声子数。

$\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{drift}}$ 为电场驱动项，具有以下形式

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{drift}} = -e\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}, \quad (2.7)$$

其中 e 表示电子电荷 ($e < 0$)， \mathbf{E} 是外加电场。

$\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{dif}}$ 表示的是电子浓度梯度引起的空间扩散项，

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{dif}} = -\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}. \quad (2.8)$$

上面我们给出了 III-V 族半导体块体材料中的动力学自旋 Bloch 方程的具体形式，要想得到低维受限体系的方程形式只需要在块体材料的基础上做一些简单变换即可，这会在后面的章节中有所讨论。接下来我们来看一下新型二维材料的典型代表单层石墨烯中的动力学自旋 Bloch 方程的具体形式 [104, 154]。

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{coh}} + \partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{scat}} + \partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{drift}} + \partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{dif}}, \quad (2.9)$$

跟方程 (2.1) 不同的是这里多了一个能谷指标 μ （单层石墨烯中能量最低的两个不等价能谷）， $\hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ 表示的是能谷 μ 中单粒子密度矩阵。

相干进动项为

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{coh}} = -i \left[(g\mu_B \mathbf{B} + \mathbf{\Omega}_{\mu\mathbf{k}}) \cdot \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2} + \hat{\Sigma}_{\text{HF}}^{\mu}(\mathbf{k}), \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \right], \quad (2.10)$$

其中 Hartree-Fock 自能 $\hat{\Sigma}_{\text{HF}}^{\mu}(\mathbf{k}) = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\mu 11} I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}'}$ ， $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\mu\nu\nu'} = V_{\mathbf{q}}^0 / [1 - V_{\mathbf{q}}^0 \Pi(\mathbf{q}, \varepsilon_{\mu\nu\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mu\nu'\mathbf{k}-\mathbf{q}})]$ 为动态屏蔽后的库仑势， $V_{\mathbf{q}}^0 = 2\pi\nu_{\text{F}} r_s / q$ 是二维裸库仑势，在无规相位近似下 [220-222]

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mu\nu\nu'\mathbf{k}s} |T_{\mathbf{k}\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu\nu\nu'}|^2 \frac{f_{\mathbf{k}s}^{\mu\nu} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^{\mu\nu'}}{\varepsilon_{\mu\nu\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mu\nu'\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega + i0^+}, \quad (2.11)$$

$T_{\mathbf{k}\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu\nu\nu'} = \psi_{\mathbf{k}}^{\mu\nu\dagger} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu\nu'}$ ， $I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu 1\dagger} \psi_{\mathbf{k}'}^{\mu 1}|^2$ ， $\varepsilon_{\mu\nu\mathbf{k}} = \nu\nu_{\text{F}}|\mathbf{k}|$ ， $\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\nu} = 1/\sqrt{2}(\mu\nu e^{-i\mu\theta_{\mathbf{k}}}, 1)^{\text{T}}$ ，这里 $\nu = \pm 1$ 分别表示导带和价带。

散射项包括

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}|_{ei} = -\pi n_i \sum_{\mathbf{k}'} |U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\mu 1}|^2 I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_{\mu\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mu\mathbf{k}}) (\hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}'}^> \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}^< - \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}'}^< \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}^>) + \text{H.c.}, \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}|_{ep} = & -\pi \sum_{\mu'\mathbf{k}'\lambda,\pm} |M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^\lambda|^2 \delta(\varepsilon_{\mu'\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mu\mathbf{k}} \pm \omega_{\lambda,\mathbf{k}-\mathbf{k}'}) (N_{\lambda,\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^\pm \hat{\rho}_{\mu'\mathbf{k}'}^> \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}^< \\ & - N_{\lambda,\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^\mp \hat{\rho}_{\mu'\mathbf{k}'}^< \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}^>) + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}|_{ee} = & -\pi \sum_{\mu'\mathbf{k}'\mathbf{k}''} |V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\mu 11}|^2 I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} I_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_{\mu\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mu\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mu'\mathbf{k}''} - \varepsilon_{\mu'\mathbf{k}'}) \\ & \times \left[\text{Tr} (\hat{\rho}_{\mu'\mathbf{k}''}^< \hat{\rho}_{\mu'\mathbf{k}'}^>) \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}'}^> \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}^< - \text{Tr} (\hat{\rho}_{\mu'\mathbf{k}''}^> \hat{\rho}_{\mu'\mathbf{k}'}^<) \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}'}^< \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}^> \right] + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

这里 $\varepsilon_{\mu\mathbf{k}} \equiv \varepsilon_{\mu\nu=1\mathbf{k}}$ 。需要指出的是这些散射项都是自旋守恒散射，这里我们没有考虑导带价带间自旋混合导致的自旋翻转散射。

电场驱动项为

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{drift}} = -e\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}. \quad (2.15)$$

空间扩散项可以写成

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|_{\text{dif}} = -\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mu\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}. \quad (2.16)$$

从单层石墨烯的动力学自旋 Bloch 方程出发可以很容易得到晶格结构相似的材料（比如说双层石墨烯、单层 MoS₂ 等）的方程形式，我们会在后面的章节涉及具体工作的时候加以讨论。

2.2 时间域的自旋弛豫

在章节 1.2 中，我们已经简单介绍了几种主要的自旋弛豫机制。本小节中我们从动力学自旋 Bloch 方程出发进一步讨论一下这些弛豫机制。需要说明的是这里只考虑跟我们工作密切相关的 DP 和 EY 机制而 BAP 机制不在讨论的范围之内。

2.2.1 Elliott-Yafet 自旋弛豫机制

要研究 EY 机制下的自旋弛豫，我们只需要考虑动力学自旋 Bloch 方程 (2.1) 中的散射项（包括电子-杂质、电子-声子、电子-电子库仑散射）即可，散射项中的自旋守恒部分不起作用只有自旋翻转部分导致 EY 自旋弛豫，这里我们没有考虑外场的影响。严格意义上说这里我们讨论的自旋弛豫机制是 Elliott 机制，来源于导带价带间自旋混

合 $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ [见公式 (2.4)-(2.6)], 对于 III-V 族半导体块体材料中最低导带电子而言 [3],

$$\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = 1 - i\lambda_c(\mathbf{k} \times \mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.17)$$

这里 $\lambda_c = \frac{\eta(1-\eta/2)}{3m_c E_g(1-\eta/3)}$, $\eta = \Delta_{\text{so}}/(E_g + \Delta_{\text{so}})$, E_g 和 Δ_{so} 分别表示导带和价带间的能隙以及价带自旋劈裂能。特别地, 当价带自旋劈裂能远小于能隙的时候, 导带价带间自旋混合非常小一般可以不用考虑 (除非体系中只有 EY 自旋弛豫机制比如说中心反演对称的材料), 此时 $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = 1$ 所有散射项中只有自旋守恒的贡献不会导致 Elliott 自旋弛豫。

2.2.2 D'yakonov-Perel' 自旋弛豫机制

我们在前面讲过 DP 自旋弛豫是由电子自旋进动时感受到的非均匀扩展和所有散射包括自旋守恒和自旋翻转散射共同导致的。非均匀扩展是由动力学自旋 Bloch 方程中的相干进动项来描述的, 自旋轨道耦合的有效磁场是动量依赖的提供直接的非均匀扩展, 外加磁场跟 Hartree-Fock 自能的有效磁场虽然不能直接提供非均匀扩展但是会影响自旋轨道耦合引起的非均匀扩展, 因此最终的非均匀扩展是三者共同作用的结果。当散射项中只有自旋守恒散射的时候 [公式 (2.4)-(2.6) 中 $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = 1$], 体系中只有 DP 自旋弛豫机制, 当散射中既有自旋守恒又有自旋翻转的时候情况变得比较复杂, 除了 DP 机制 (非均匀扩展和所有散射共同导致) 外, 还有自旋翻转散射自身引起的 EY 机制 (参见章节 2.2.1), 这时候利用动力学自旋 Bloch 方程计算得到的自旋弛豫时间 τ_{tot} 是两个机制共同作用的结果, 此时 DP 自旋弛豫时间 τ_{DP} 可以利用关系 $\tau_{\text{tot}}^{-1} = \tau_{\text{DP}}^{-1} + \tau_{\text{EY}}^{-1}$ 得到 [223], 其中 τ_{EY} 表示 EY 自旋弛豫时间。如果体系中还有外加驱动电场则需要将动力学自旋 Bloch 方程中的驱动项考虑进来。

接下来我们举一个简单例子来看一下如何从动力学自旋 Bloch 方程出发计算 DP 自旋弛豫时间。我们在一个具有抛物能谱的二维电子系统中仅考虑了 Rashba 自旋轨道耦合和自旋守恒的电子-杂质散射的影响, 其它的比如说外场、Hartree-Fock 自能、电子-声子散射以及电子-电子库仑散射等都没有考虑。此时体系的动力学自旋 Bloch 方程形式为

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(t) = -i[\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2}, \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(t)] - 2\pi n_i \sum_{\mathbf{k}'} |V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) [\hat{\rho}_{\mathbf{k}}(t) - \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}(t)]. \quad (2.18)$$

这里 $\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}} = \alpha_{\text{R}}(-k_y, k_x, 0)$ 表示 Rashba 自旋轨道耦合提供的有效磁场 [44], $|V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2$ 是电子-杂质散射矩阵元, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{2m^*}$ 为电子的动能项。

我们将方程 (2.18) 中的 $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}(t)$ 关于角度 $\theta_{\mathbf{k}}$ 做傅立叶变换, 即 $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}(t) = \sum_l \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(t) e^{il\theta_{\mathbf{k}}}$, 可以得到以下形式

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(t) = -\frac{\alpha_{\text{R}} k}{4} [\sigma_+, \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{l+1}(t)] + \frac{\alpha_{\text{R}} k}{4} [\sigma_-, \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{l-1}(t)] - \frac{\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(t)}{\tau_{\mathbf{k}}^l}, \quad (2.19)$$

其中 $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$ ，电子-杂质散射导致的动量散射率为

$$\frac{1}{\tau_k^l} = \frac{m^*n_i}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta |V_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos l\theta), \quad (2.20)$$

这里 $|V_{\mathbf{q}}|^2$ 只依赖于 $|\mathbf{q}| = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ 。在强散射条件下 ($\alpha_R k \tau_k^l \ll 1$)，我们只保留 $\hat{\rho}_k^l(t)$ 的 $l = 0, \pm 1$ 阶，通过简单计算可以得到关于 $\hat{\rho}_k^0(t)$ 的二阶微分方程

$$\partial_t^2 \hat{\rho}_k^0(t) + \frac{1}{\tau_k^1} \partial_t \hat{\rho}_k^0(t) + \frac{\alpha_R^2 k^2}{8} [\sigma_x, [\sigma_x, \hat{\rho}_k^0(t)]] + \frac{\alpha_R^2 k^2}{8} [\sigma_y, [\sigma_y, \hat{\rho}_k^0(t)]] = 0. \quad (2.21)$$

我们定义自旋极化矢量 $\mathbf{S}_k^0(t) = \text{Tr}[\hat{\rho}_k^0(t) \hat{\boldsymbol{\sigma}}]$ ，可得方程

$$\left[\partial_t^2 + \frac{1}{\tau_k^1} \partial_t + \frac{1}{2} \alpha_R^2 k^2 (1 + \delta_{\alpha z}) \right] S_{k\alpha}^0(t) = 0, \quad (2.22)$$

其中 $\alpha = x, y, z$ 。方程的解为

$$S_{k\alpha}^0(t) = \frac{S_{k\alpha}^0(0)}{2} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - c_\alpha^2}} \right) e^{-\frac{t}{2\tau_k^1} (1 - \sqrt{1 - c_\alpha^2})} + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 - c_\alpha^2}} \right) e^{-\frac{t}{2\tau_k^1} (1 + \sqrt{1 - c_\alpha^2})} \right], \quad (2.23)$$

这里 $c_\alpha = \sqrt{2(1 + \delta_{\alpha z})} \alpha_R k \tau_k^1$ 。进一步利用强散射条件即 $c_\alpha \ll 1$ 可得

$$S_{k\alpha}^0(t) \approx S_{k\alpha}^0(0) e^{-\frac{t}{4\tau_k^1/c_\alpha^2}} \equiv S_{k\alpha}^0(0) e^{-\frac{t}{\tau_s^x}}, \quad (2.24)$$

$$\tau_s^x = \tau_s^y = 2\tau_s^z = 2/(\alpha_R^2 k^2 \tau_k^1). \quad (2.25)$$

这里计算得到的自旋弛豫时间跟章节 1.2.1.2 中给出的结果在定性上是一致的，都和动量散射时间成反比，与自旋轨道耦合强度的平方成正比。需要指出的是自旋弛豫时间的各向异性是由 Rashba 自旋轨道耦合的形式决定的即有效磁场只在平面内 (xy 平面) 没有平面外分量 (z 方向)。

在弱散射区 ($\alpha_R k \tau_k^l > 1$)，密度矩阵的高阶项 ($|l| > 1$) 可能会对自旋弛豫起着很重要的作用，此时很难得到一个收敛的解析结果。另外，当考虑进非弹性的电子-声子和电子-电子库仑散射后，自旋弛豫时间也很难有严格的解析公式。以上这些情况 (无论散射强弱弹性非弹性散射) 都可以通过严格地数值求解动力学自旋 Bloch 方程来解决 [7]。

2.3 空间域的自旋输运

在本小节我们从动力学自旋 Bloch 方程出发来讨论一下空间域的自旋输运问题。动

力学自旋 Bloch 方程的形式见公式 (2.1) 和 (2.9)，其中最重要的当属空间扩散项，它是空间域的自旋输运不同于时间域的自旋弛豫的根源所在。我们先来简单看看该空间扩散项的影响，假设自旋沿着 x 方向扩散。不考虑方程 (2.1) 中的散射项、电场驱动项以及 Hartree-Fock 自能，则该方程有稳态解 $[\hat{\rho}_{\mathbf{k}}(x) \equiv \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(x, t = +\infty)]$

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}(x) = e^{-i\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} x/2} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(0) e^{i\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} x/2}, \quad (2.26)$$

其中空间域中自旋进动频率为

$$\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{k}} = \frac{\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}} + g\mu_B \mathbf{B}}{\partial_{k_x} \varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (2.27)$$

这里分子项 ($\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}} + g\mu_B \mathbf{B}$) 即为时间域的自旋进动频率，分母项 $\partial_{k_x} \varepsilon_{\mathbf{k}}$ 是载流子的群速度，来源于空间扩散项。群速度的存在使得空间域的非均匀扩展跟时间域的很不一样，最简单的一个例子就是外加磁场在时间域不能提供直接的非均匀扩展但在空间域却可以，更通俗地来说就是外磁场跟散射一起不能导致时间域的自旋弛豫但在空间域的自旋输运中却可以。

接下来我们举一个具体例子来看一下如何从动力学自旋 Bloch 方程出发计算体系的自旋扩散长度。我们在具有抛物能谱和 Rashba 自旋轨道耦合的二维电子系统中考虑自旋守恒的电子-杂质散射对自旋输运（沿着 x 方向）的影响，这里我们只讨论稳态的情况，相应的动力学自旋 Bloch 方程可写成

$$-i[\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2}, \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(x)] - 2\pi n_i \sum_{\mathbf{k}'} |V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) [\hat{\rho}_{\mathbf{k}}(x) - \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}(x)] - \frac{k}{m^*} \cos \theta_{\mathbf{k}} \partial_x \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(x) = 0. \quad (2.28)$$

利用 $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(x) e^{-il\theta_{\mathbf{k}}}$ 可得

$$\partial_x [\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{l+1}(x) + \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{l-1}(x)] + \beta[\sigma_+, \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{l+1}(x)] - \beta[\sigma_-, \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{l-1}(x)] + \frac{2m^*}{k} \frac{\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(x)}{\tau_{\mathbf{k}}^l} = 0, \quad (2.29)$$

其中 $\beta = \alpha_R m^*/2$ 。在强散射条件下我们可以只保留 $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(x)$ 的最低两阶 $|l| = 0, 1$ ，上面的方程变为

$$\partial_x [\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^1(x) + \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{-1}(x)] + \beta[\sigma_+, \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^1(x)] - \beta[\sigma_-, \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{-1}(x)] = 0, \quad (2.30)$$

$$\partial_x \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^0(x) - \beta[\sigma_-, \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^0(x)] + \frac{2m^*}{k} \frac{\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^1(x)}{\tau_{\mathbf{k}}^1} = 0, \quad (2.31)$$

$$\partial_x \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^0(x) + \beta[\sigma_+, \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^0(x)] + \frac{2m^*}{k} \frac{\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{-1}(x)}{\tau_{\mathbf{k}}^1} = 0. \quad (2.32)$$

通过简单计算很容易得到关于 $\hat{\rho}_k^0(x)$ 的二阶微分方程,

$$\partial_x^2 \hat{\rho}_k^0(x) + 2i\beta[\sigma_y, \partial_x \hat{\rho}_k^0(x)] - \beta^2[\sigma_x, [\sigma_x, \hat{\rho}_k^0(x)]] - \beta^2[\sigma_y, [\sigma_y, \hat{\rho}_k^0(x)]] = 0. \quad (2.33)$$

我们定义自旋极化矢量 $\mathbf{S}_k^0(x) \equiv \text{Tr}[\hat{\rho}_k^0(x)\hat{\boldsymbol{\sigma}}]$ 可以得到以下方程

$$\begin{pmatrix} \partial_x^2 - 4\beta^2 & 0 & -4\beta\partial_x \\ 0 & \partial_x^2 - 4\beta^2 & 0 \\ 4\beta\partial_x & 0 & \partial_x^2 - 8\beta^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{kx}^0(x) \\ S_{ky}^0(x) \\ S_{kz}^0(x) \end{pmatrix} = 0. \quad (2.34)$$

利用边界条件 $\mathbf{S}_k^0(x = +\infty) = 0$ 我们可以解出 $\mathbf{S}_k^0(x)$ 。当初始的自旋极化分别沿着 x, y, z 方向的时候, 相应的自旋扩散长度分别为 $l_{x,y,z}$

$$l_x = l_z = \frac{1}{\beta\sqrt{2\sqrt{2}-1}}, \quad (2.35)$$

$$l_y = \frac{1}{2\beta}. \quad (2.36)$$

我们发现自旋扩散长度跟自旋轨道耦合强度成反比, 对散射不敏感, 这跟时间域中在强散射条件下自旋驰豫时间跟动量散射时间成反比完全不同 (参见章节 2.2.2)。另外, 这里得到的自旋扩散长度的各向异性跟漂移-扩散模型得到的很不一样, 在漂移-扩散模型中 $l_{x,y,z} = \sqrt{D\tau_s^{x,y,z}}$, 而 $\tau_s^x = \tau_s^y = 2\tau_s^z$ (参见章节 2.2.2), 于是有 $l_x = l_y = \sqrt{2}l_z$, 这表明漂移-扩散模型在这里不适用。

第三章 (111) GaAs 量子阱中的载流子自旋弛豫

在过去的十多年里半导体自旋电子学发展迅速，其中半导体量子阱中的自旋动力学受到了很大的关注 [1-4, 6-9]。在 III-V 族闪锌矿量子阱系统中，自旋弛豫主要是由 DP 机制决定的，我们前面讲过 DP 机制来源于散射和自旋轨道耦合（包括 Dresselhaus [85] 和 Rashba [44]）引起的非均匀扩展的共同作用。为了得到很长的 DP 自旋弛豫时间，人们做了很多努力比如说改变量子阱的生长方向、Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的强度、初始自旋极化的取向等。具体来说，在 (001) 量子阱中，只考虑 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的线性项，当它们的强度相等的时候，体系总的有效磁场只沿着 [110] 或者 $[1\bar{1}0]$ 方向，将初始的电子自旋极化方向选在总的有效磁场方向就可以得到无穷长的 DP 自旋弛豫时间 [24, 224-233]。在对称的 (110) 量子阱中考虑电子只占据最低子带的情况，Dresselhaus 自旋轨道耦合的有效磁场沿着量子阱生长方向，这会使得沿着该方向的电子自旋极化不会感受到 DP 机制的作用 [234-236]。对于 (111) 量子阱而言，最低电子子带的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的线性项具有完全相同的动量依赖，当调节两者强度使它们恰好相互抵消的时候体系中总的自旋轨道耦合严格为零，此时任何方向的电子自旋极化都不会发生 DP 自旋弛豫 [237]。当把 Dresselhaus 自旋轨道耦合中立方项考虑进来后 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合不能完全相消了，只有平面内（垂直于量子阱生长方向）的有效磁场可以在某一特殊的动量圈上严格为零，此时平面外（沿着量子阱生长方向）自旋的 DP 弛豫时间可以很长 [103]。最近我们发现在 (111) 量子阱中最低空穴子带的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合之间也能实现相消，对于轻空穴而言，两者的平面内分量只能在某一特殊的动量圈上相消，这跟电子的情况非常类似，对于重空穴而言，两者的平面内分量几乎可以完全相消，不同于电子和轻空穴的情况 [111]。需要说明的是对于轻重空穴而言，自旋轨道耦合的平面外分量理论上讲可以相消但相消所需的条件目前实验上很难实现。在这一章中我们主要讨论一下 (111) GaAs 量子阱中的电子以及轻重空穴的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合是怎么相消的，自旋轨道耦合的相消又会对 DP 自旋弛豫产生怎样的影响。

3.1 (111) GaAs 量子阱中电子自旋弛豫的理论研究

3.1.1 哈密顿量

假设 x, y, z 轴分别沿着 $[1\bar{1}0], [11\bar{2}], [111]$ ，(111) GaAs 量子阱中最低电子子带的有

效哈密顿量为 [103]

$$H_e = \frac{k^2}{2m_e} + \mathbf{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}, \quad (3.1)$$

$$\Omega_x(\mathbf{k}) = \gamma \left(\frac{-k^2 + 4\langle k_z^2 \rangle_{00}}{2\sqrt{3}} \right) k_y - \alpha e E_z k_y, \quad (3.2)$$

$$\Omega_y(\mathbf{k}) = -\gamma \left(\frac{-k^2 + 4\langle k_z^2 \rangle_{00}}{2\sqrt{3}} \right) k_x + \alpha e E_z k_x, \quad (3.3)$$

$$\Omega_z(\mathbf{k}) = \gamma \frac{k_x^3 - 3k_x k_y^2}{\sqrt{6}}. \quad (3.4)$$

这里， γ 和 α 分别表示 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合强度， E_z 是门电压引起的外加电场， $\langle k_z^2 \rangle_{00} = (\pi/a)^2$ ， a 表示量子阱的阱宽。Cartoixa 等人 [237] 指出只考虑自旋轨道耦合的线性项的时候，在某一特殊的外加电场 $E_z = 4\langle k_z^2 \rangle_{00}\gamma/(2\sqrt{3}\alpha e)$ 下 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合可以严格相消即总的自旋轨道耦合为零，此时任何方向的自旋极化都不会发生 DP 自旋弛豫。在这之后，Sun 等人 [103] 进一步把 Dresselhaus 自旋轨道耦合中的立方项考虑进来，有效磁场 $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$ 在动量空间的示意图如图 3-1 所示，此时 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合不能严格相消，只有平面内的有效磁场在某一特殊的动量圈 ($k^2 = k_c^2 \equiv 4\langle k_z^2 \rangle_{00} - 2\sqrt{3}\alpha e E_z/\gamma$) 上严格为零。这种相消方式很容易受到温度的影响，只有在低温下相消比较明显，当温度升高后，电子会在动量空间扩展开来，相消会被弱化，在有限温度时相消的条件近似变为 $\langle k^2 \rangle = k_c^2$ 。除了温度外，电子浓度对相消也会有很显著的影响，因为随着浓度的改变 $\langle k^2 \rangle$ 也会相应地变化（尤其在强简并的时候）。接下来我们具体讨论一下 DP 自旋弛豫对温度和浓度的依赖。

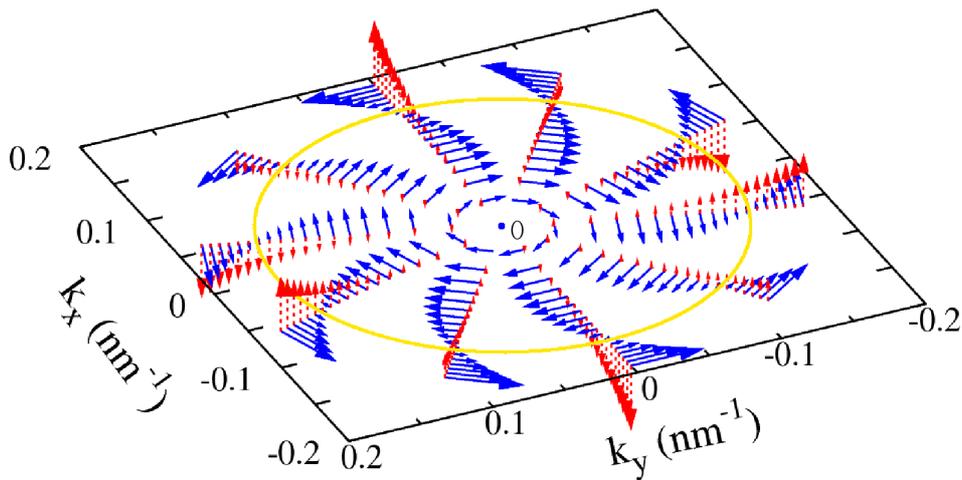


图 3-1: 有效磁场 $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$ 在动量空间的示意图，蓝色实线和红色短划线的箭头分别表示有效磁场的平面内和平面外分量。特别地，平面内有效磁场在黄色的动量圈 $k^2 = k_c^2$ 上严格为零。摘自文献 [103]。

3.1.2 数值结果

通过数值求解动力学自旋 Bloch 方程 [7] 可以得到 DP 自旋弛豫时间，方程中包括了所有相关的散射项，具体形式可以参考文献 [96] 和 [94]。初始的自旋极化沿着 z 方向，其它情况会特别说明，极化大小选取为 0.025，需要指出的是自旋弛豫时间对小的自旋极化不敏感 [93, 94]。

3.1.2.1 自旋弛豫时间对电子浓度的依赖

我们先来研究一下电子浓度对自旋弛豫时间的影响。图 3-2 中给出了不同外加电场下自旋弛豫时间随电子浓度的变化，当 $E_z < 82$ kV/cm 时出现了两个峰，并且当 E_z 从 80 增大到 81 kV/cm 的时候，两个峰中用箭头标记的那个向低浓度区域移动 (从 $N_e = 3.6 \times 10^{11}$ 变到 $2.1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$)，另一个峰始终出现在 $N_e = 0.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 附近。当 $E_z \geq 82$ kV/cm 的时候，只在 $N_e = 0.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 处看到一个峰。

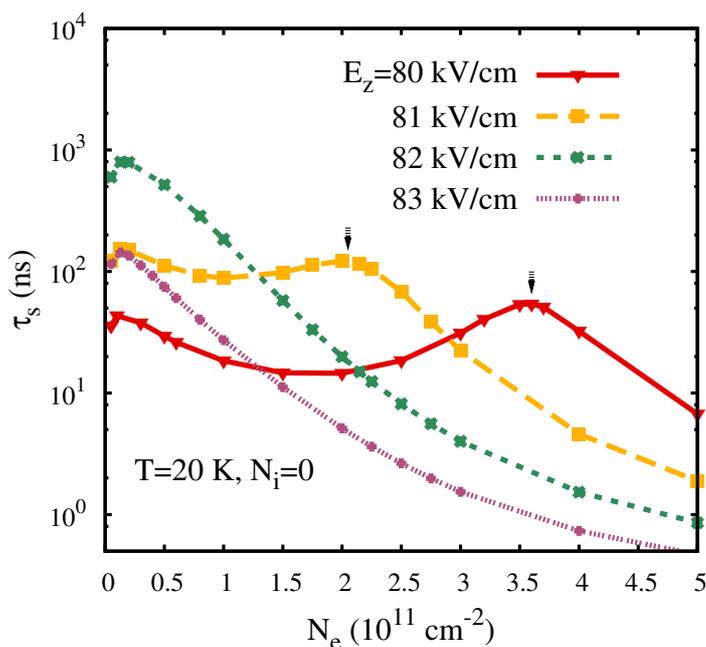


图 3-2: 不同外加电场下自旋弛豫时间随电子浓度 N_e 的变化。温度 $T = 20$ K, 杂质浓度 $N_i = 0$ 。摘自文献 [103]。

根据前面给出的相消条件可知当 $k_c^2 > 0$ 即 $E_z < E_z^c = 82.8$ kV/cm 的时候，相消可以发生，而当 $E_z > E_z^c = 82.8$ kV/cm 的时候相消不可能出现。我们先来看一下 $E_z < E_z^c$ 的情况。始终出现在 $0.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 附近的峰是由电子-电子库仑散射引起的 [100, 102]，我们称之为库仑峰。另一个峰 (用箭头标记的) 的位置是随外加电场变化的，是由自旋轨道耦合的相消引起的，我们称之为相消峰。随着外加电场的增大 k_c^2 会变小使得相消峰的位置向低浓度区域移动。需要说明的是当 $E_z = 82$ kV/cm 的时候两

个峰几乎重合在一起，这会使自旋弛豫时间显著变长。再来看 $E_z > E_z^c$ 的情况，此时不会出现相消也就没有相消峰，体系中只有一个出现在 $0.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 附近的库仑峰。

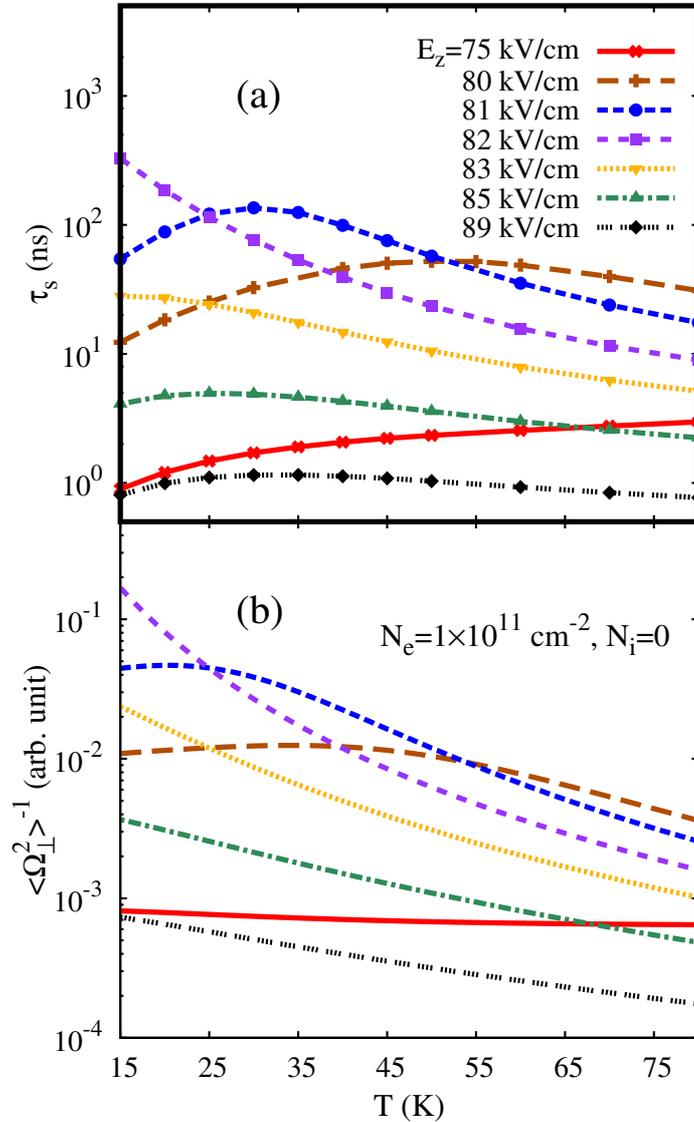


图 3-3: (a) 不同外加电场下自旋弛豫时间随温度 T 的变化。(b) $\langle \Omega_{\perp}^2(\mathbf{k}) \rangle^{-1}$ 的温度依赖关系。电子浓度 $N_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ，杂质浓度 $N_i = 0$ 。摘自文献 [103]。

3.1.2.2 自旋弛豫时间对温度的依赖

在这一小节我们来讨论一下自旋弛豫时间对温度的依赖。图 3-3 (a) 中给出了不同外加电场下自旋弛豫时间随温度的变化，当 $E_z > 83 \text{ kV/cm}$ 的时候，我们看到了一个峰而且随着外加电场的变大峰的位置向高温区域移动。当外加电场减小到 $E_z < 82 \text{ kV/cm}$ 的

时候，我们也能看到一个峰但随外加电场的变大峰的位置向温度较低的区域移动。需要指出的是当 $E_z = 75$ kV/cm 的时候，在计算的温度范围内只看到自旋弛豫时间随温度升高而单调变大。另外当 $E_z = 82, 83$ kV/cm 的时候，在计算的温度范围内自旋弛豫时间随温度升高而单调减小。接下来我们先对有峰的情况进行分析，最后补充说明一下自旋弛豫时间单调变化的情况。

我们先来看一下 $E_z > 83$ kV/cm 的情况，此时相消不能发生，出现的峰为库仑峰 [96, 100, 102, 106]。随着外加电场的减小，库仑峰的位置向温度较低的区域移动，这是因为非均匀扩展的逆 $\langle \Omega_{\perp}^2(\mathbf{k}) \rangle^{-1}$ 随温度的升高减小得更快，如图 3-3 (b) 所示。当 $E_z < 82$ kV/cm 的时候，相消可以发生，自旋弛豫时间的温度依赖关系中出现的峰为相消峰（库仑峰在温度很低的地方不在计算的温度范围之内），随着外加电场的减小，相消峰的位置向温度较高的区域移动，这是因为 k_c^2 变大使得发生相消时所需温度也随着升高。当 E_z 减小到 75 kV/cm 的时候，相消峰的位置已经超过了计算的温度范围的上限，因此在计算的温度范围内我们只能看到自旋弛豫时间随温度的升高而单调变大。需要指出的是当 $E_z < 82$ kV/cm 的时候，库仑峰始终是存在的，只是峰的位置低于计算的温度范围的下限。另外，当 $E_z = 82$ kV/cm 的时候，库仑峰和相消峰同时存在但峰的位置都低于计算的温度范围的下限，当 $E_z = 83$ kV/cm 的时候，没有相消峰只有库仑峰（峰的位置也低于计算的温度范围的下限），因此当 $E_z = 82, 83$ kV/cm 的时候，在计算的温度范围内我们只能看到自旋弛豫时间的单调变化。

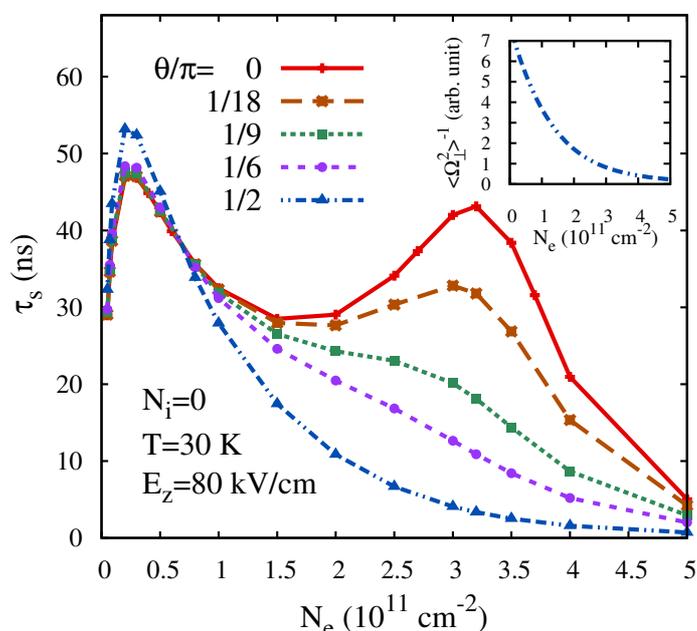


图 3-4: 不同初始自旋极化方向下自旋弛豫时间对电子浓度的依赖关系。 θ 是初始自旋极化方向跟 z 轴的夹角。插图中给出了 $\theta = \pi/2$ 时 $\langle \Omega_{\perp}^2(\mathbf{k}) \rangle^{-1}$ 随电子浓度的变化。 $T = 30$ K, $E_z = 80$ kV/cm, 杂质浓度 $N_i = 0$ 。摘自文献 [103]。

3.1.2.3 自旋弛豫的各向异性

从自旋轨道耦合提供的有效磁场形式 [见公式 (3.2)-(3.4)] 可知，只有平面内分量可以实现相消，因此随着自旋极化方向的改变自旋弛豫将会表现出各向异性。图 3-4 中给出了不同初始自旋极化方向下自旋弛豫时间随电子浓度的变化， θ 表示的是初始自旋极化方向跟 z 轴的夹角。当 $\theta = 0$ 的时候，初始自旋极化沿着 z 轴，我们看到两个峰，浓度较高的为相消峰，浓度较低的是库仑峰，这在前面已经讨论过了。随着 θ 变大，相消峰逐渐消失，这是因为有效磁场的 z 分量变得越来越重要使得相消效应变弱。特别地，当 $\theta = \pi/2$ 即初始自旋极化在 xy 平面（比如说 x 轴）的时候，非均匀扩展为 $\langle \Omega_{\perp}^2(\mathbf{k}) \rangle = \langle \Omega_y^2(\mathbf{k}) + \Omega_z^2(\mathbf{k}) \rangle$ ，它随电子浓度增加而单调变大如图 3-4 中插图所示，此时相消已经完全被压制了，相消峰消失只剩下库仑峰。

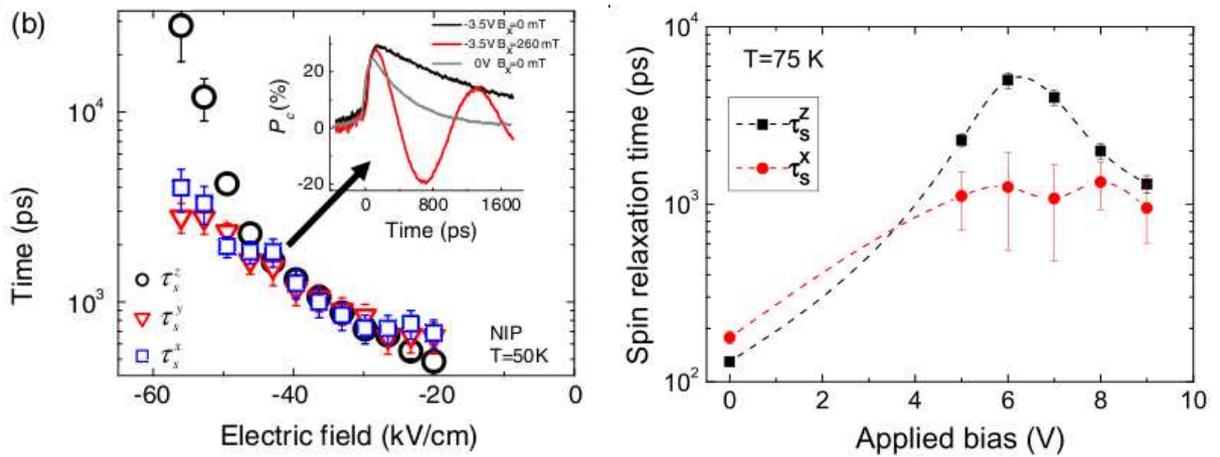


图 3-5: 左图: 自旋弛豫时间随外加电场的变化, $\tau_s^{x,y,z}$ 分别表示 x, y, z 方向的自旋弛豫时间。摘自文献 [238]。右图: $\tau_s^{x,z}$ 随外加电场的变化。摘自文献 [239]。

3.2 (111) GaAs 量子阱中电子自旋弛豫的实验研究

在本小节我们来讨论一下 (111) GaAs 量子阱中电子自旋弛豫的相关实验工作。Balocchi 等人 [238] 利用时间可分辨的光致发光方法测量了 (111) GaAs/AlGaAs 量子阱中的电子自旋弛豫时间。图 3-5 左图中给出了 x, y, z 三个方向的自旋弛豫时间 $\tau_s^{x,y,z}$ 随外加电场的变化，我们发现当电场从 20 增加到 55 kV/cm 的时候 τ_s^z 变大了两个量级达到几十纳秒左右，这么显著的变化物理原因在于随着电场变大 Rashba 自旋轨道耦合强度也逐渐变大与 Dresselhaus 自旋轨道耦合的相消变得更明显。此外，平面内的自旋弛豫时间在外加电场的调控下也有明显的变化，当电场较小（20 kV/cm 左右）的时候平面内自旋弛豫时间比平面外的来得长一些，随着电场逐渐变大两者变得可比拟，当电场很大（50 kV/cm 左右）的时候，平面内的自旋弛豫时间要比平面外的小一个量级左右，自旋弛豫表现出非常强的各向异性。这个实验现象很好解释，当电场较

小的时候相消很不明显，此时自旋轨道耦合的线性项 [见公式 (3.2)-(3.4)] 占主导地位，平面外的自旋弛豫时间约为平面内自旋弛豫时间的一半 [7]。当电场变得很大接近相消的时候，自旋轨道耦合的平面内分量被很强地压制了但平面外分量的三次方项始终存在，自旋轨道耦合的各向异性导致了自旋弛豫的各向异性，这在章节 3.1.2.3 中已经讨论过了。

在上面的实验中由于实验条件的限制外加电场最大只能达到 55 kV/cm 左右，该电场小于相消的临界电场我们只能看到自旋弛豫时间随外加电场单调变化。实际上，根据理论预期，自旋弛豫时间的电场依赖中会出现一个峰值 [237]。在这之后，Wang 等人 [239] (跟 Balocchi 等人是同一个实验小组) 在另一实验中施加了更大的门电压观测到了自旋弛豫时间随外加电场变化的非单调行为如图 3-5 右图所示，峰值的位置对应的门电压约为 6 V。

3.3 (111) GaAs 量子阱中的空穴自旋弛豫

在章节 3.1 和 3.2 中我们讨论了 (111) GaAs 量子阱中电子的自旋弛豫，当电子的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合发生相消时自旋弛豫时间可以变得很长。跟电子的情况类似，(111) GaAs 量子阱中轻重空穴的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合也能相消从而导致非常长的自旋弛豫时间。在本章节中我们来具体讨论一下 (111) GaAs 量子阱中的空穴自旋弛豫。

3.3.1 轻重空穴的有效哈密顿量

我们的研究集中在 p 型 (111) GaAs/AlAs 以及 GaAs/InP 量子阱中。轻重空穴可以用 4×4 的哈密顿量来描述 [111]

$$H_{4 \times 4} = H_L + H_{8v8v}^b + H_\epsilon + V(z)I_4 + H_E I_4. \quad (3.5)$$

这里， $H_L = H_L^{(0)} + H_L^{(II)}$ 是 Luttinger 哈密顿量 [240]，其中 $H_L^{(0)}$ 对应的是取平面内动量为零之后的结果， H_{8v8v}^b 表示块体材料中轻重空穴带的 Dresselhaus 自旋轨道耦合 [85]， H_ϵ 是基于 Bir 和 Pikus 理论的应力哈密顿量 [86, 241]，它们的具体形式参见附录 A.2。 $V(z)$ 表示沿着量子阱生长方向的无限深势阱约束， I_4 是一个 4×4 的单位阵， $H_E = -eE_z z$ 代表外加电场项是 Rashba 自旋轨道耦合的来源 [44]。

通过求解关于哈密顿量 $H_0 = H_L^{(0)} + V(z)I_4 + H_\epsilon$ 的 Schrödinger 方程，我们可以得到轻 (l) 重 (h) 空穴子带的能量为

$$E_{n_z}^{h,l} = \frac{n_z^2 \pi^2}{2m_z^{h,l} a^2} \mp E_S^1 - E_S^2, \quad (3.6)$$

其中 n_z 表示子带指标, a 是量子阱阱宽, $m_z^{h,l} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_3}$ 分别表示重空穴、轻空穴沿着 z 轴的有效质量, $\gamma_{1,3}$ 和 m_0 分别表示 Kohn-Luttinger 参数以及自由电子质量。此外, $E_S^{1,2}$ 来源于应力的贡献, 具体形式见附录 A.2, 需要指出的是 E_S^2 对所有的轻重空穴子带而言只是一个能量平移, 我们在实际计算中忽略了这一项的贡献, 而 E_S^1 对轻重空穴子带的贡献是相反的, 有可能改变轻重空穴子带能级的相对位置。具体来说, 对于 GaAs/AlAs 量子阱而言, 由于晶格失配非常小, 应力的贡献可以忽略不计, 最低的空穴子带为重空穴。但是对于 GaAs/InP 量子阱而言, 由于晶格失配较大, 应力的贡献使得最低的空穴子带变为轻空穴。需要说明的是在我们的计算中只考虑空穴占据最低子带的情况。

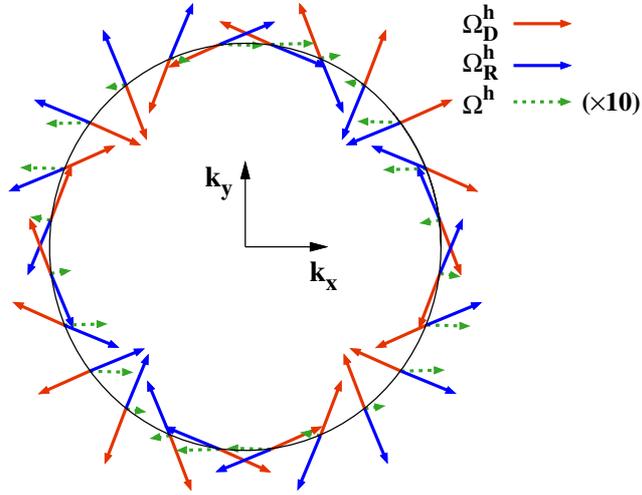


图 3-6: (111) GaAs/AlAs 量子阱中最低重空穴子带的平面内有效磁场在某一任意选取的动量圈上的示意图, 红色 (蓝色) 箭头表示 Dresselhaus (Rashba) 自旋轨道耦合 $\Omega_{D(R)}^h$, 绿色箭头表示两者之和即总的有效磁场 Ω^h , 为了看得更清楚 Ω^h 被放大了十倍。这里电场选取为相消电场 E_z^y 。摘自文献 [111]。

(111) GaAs 量子阱中最低空穴子带的有效哈密顿量可以通过子带 Löwdin 块对角化的方法得到 [86, 242], 我们保留到平面内动量的三次方项。对于 (111) GaAs/AlAs 量子阱而言, 最低空穴子带 (重空穴) 的有效哈密顿量可以写成 ($z||[111]$, $x||[11\bar{2}]$, $y||[\bar{1}10]$)

$$H_{\text{eff}}^h = \frac{\mathbf{k}^2}{2m_t^h} + (\Omega_D^h + \Omega_R^h) \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}, \quad (3.7)$$

$$\Omega_D^h = [\beta_x^h(3k_x^2k_y - k_y^3), \beta_y^h(k_x^3 - 3k_xk_y^2), \beta_z^h(3k_x^2k_y - k_y^3)], \quad (3.8)$$

$$\Omega_R^h = [\alpha_x^h(3k_x^2k_y - k_y^3), \alpha_y^h(k_x^3 - 3k_xk_y^2), \alpha_z^h(3k_x^2k_y - k_y^3)]eE_z. \quad (3.9)$$

$\Omega_{D,R}^h$ 分别表示 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的有效磁场, 平面内有效质量 m_t^h 以

及自旋轨道耦合的系数参见附录 A.1。我们发现 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合只包含平面内动量的立方项，这是因为线性项不满足体系的对称性，我们会在附录 A.4 中利用对称性分析来得到重空穴还有电子和轻空穴的自旋轨道耦合形式。比较两个自旋轨道耦合的形式可知 Ω_{Ri}^l ($i = x, y, z$) 可以和 Ω_{Di}^h 严格相消，相消电场为

$$E_z^i = -\beta_i^h / (e\alpha_i^h), \quad (3.10)$$

其中 E_z^x 和 E_z^y 非常接近，这意味着在合适的外加电场下总的有效磁场的平面内分量可以被强烈地压制，我们在相消电场 E_z^y 下给出了自旋轨道耦合的平面内分量在某一任意选取的动量圈上的示意图，可以很清楚地看到 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合几乎可以完全相消。这个相消会使得 z 方向的自旋弛豫时间变得很长。另外需要指出的是相消电场 E_z^z 太大实验上很难实现因而在我们的计算中自旋轨道耦合的平面外分量始终存在。

对于 (111) GaAs/InP 量子阱而言，最低空穴子带（轻空穴）的有效哈密顿量具体形式为

$$H_{\text{eff}}^l = \frac{\mathbf{k}^2}{2m_t^l} + (\Omega_{\text{D}}^l + \Omega_{\text{R}}^l) \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}, \quad (3.11)$$

$$\Omega_{\text{D}}^l = [(\beta_x^{l1}\mathbf{k}^2 + \beta_x^{l2}\langle k_z^2 \rangle)k_y, -(\beta_x^{l1}\mathbf{k}^2 + \beta_x^{l2}\langle k_z^2 \rangle)k_x, \beta_z^l(3k_x^2k_y - k_y^3)], \quad (3.12)$$

$$\Omega_{\text{R}}^l = [\alpha_x^l\mathbf{k}^2k_y, -\alpha_x^l\mathbf{k}^2k_x, \alpha_z^l(3k_x^2k_y - k_y^3)]eE_z, \quad (3.13)$$

$\Omega_{\text{D,R}}^l$ 分别表示 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的有效磁场，平面内有效质量 m_t^l 以及自旋轨道耦合的系数参见附录 A.1。我们发现 Dresselhaus 自旋轨道耦合中既有线性项又有立方项而 Rashba 自旋轨道耦合中只有立方项。实际上，Rashba 自旋轨道耦合中也有线性项，但是贡献太小被我们忽略了。此外，总的有效磁场的平面内分量可以在某一特殊的动量圈上严格相消，这跟前面讲过的电子中的情况类似但跟重空穴的很不一样，这些相消方式是由体系的对称性决定的，具体分析见附录 A.4。对于有效磁场的平面外分量而言，相消需要的电场太大很难实现，这跟重空穴中的情况很相似。

3.3.2 动力学自旋 Bloch 方程

我们利用动力学自旋 Bloch 方程来研究 GaAs/AlAs 以及 GaAs/InP 量子阱中的空穴自旋弛豫。方程的具体形式在章节 2.1 中已经详细介绍了，这里只介绍一下我们研究体系中的一些相关细节。在我们的计算中动力学自旋 Bloch 方程包括相干进动项和所有相关的散射项，其中相干进动项中只考虑了自旋轨道耦合的贡献，Hartree-Fock 自能在自旋极化较小的时候可以忽略 [7]。散射项包括了自旋守恒散射，也就是说，空穴-空穴 ($V_{\mathbf{q}}^2$)，空穴-杂质 ($U_{\mathbf{q}}^2$)，空穴-声学声子 ($|M_{\mathbf{Q},\text{AC}}|^2$)，空穴-纵向光学声子（极化部分） ($|M_{\mathbf{Q},\text{LO}}^{\text{polar}}|^2$) 和空穴-光学声子（非极化部分） ($|M_{\mathbf{Q},\lambda}^{\text{nonp}}|^2$) ($\lambda = \text{LO/TO}$ 表示纵

向/横向光学声子) 散射, 还有子带间自旋混合 ($\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$) 导致的自旋翻转散射。所有散射项的具体形式在章节 2.1 中已经给过了, 需要指出的是前面给的是块体材料的情况我们需要将它们变换到二维体系中去。接下来我们给出散射矩阵元的形式,

$$V_{\mathbf{q}}^2 = \left(\frac{\sum_{q_z} v_Q |I(iq_z)|^2}{\epsilon(\mathbf{q})} \right)^2, \quad (3.14)$$

$$U_{\mathbf{q}}^2 = \sum_{q_z} [Z_i v_Q / \epsilon(\mathbf{q})]^2 |I(iq_z)|^2, \quad (3.15)$$

$$|M_{\mathbf{Q},\text{LO}}^{\text{polar}}|^2 = [2\pi e^2 \omega_{\text{LO}} / (\mathbf{q}^2 + q_z^2)] (\kappa_{\infty}^{-1} - \kappa_0^{-1}) |I(iq_z)|^2, \quad (3.16)$$

$$|M_{\mathbf{Q},\lambda}^{\text{nonp,HH}}|^2 = \frac{3d_0^2}{2d\omega_{\lambda} a_{\text{GaAs}}^2} |I(iq_z)|^2, \quad (3.17)$$

$$|M_{\mathbf{Q},\lambda}^{\text{nonp,LH}}|^2 = \frac{\eta d_0^2}{2d\omega_{\lambda} a_{\text{GaAs}}^2} |I(iq_z)|^2, \quad (3.18)$$

$$|M_{\mathbf{Q},\text{AC}}^{\text{def}}|^2 = \frac{\Xi^2 Q}{2dv_{\text{sl}}} |I(iq_z)|^2, \quad (3.19)$$

$$|M_{\mathbf{Q},\text{AC}}^{\text{pl}}|^2 = \frac{32\pi^2 e^2 e_{14}^2 (3q'_x q'_y q'_z)^2}{\kappa_0^2 dv_{\text{sl}} Q^7} |I(iq_z)|^2, \quad (3.20)$$

$$|M_{\mathbf{Q},\text{AC}}^{\text{pt}}|^2 = \frac{32\pi^2 e^2 e_{14}^2}{\kappa_0^2} \frac{1}{dv_{\text{st}} Q^5} \left[q_x'^2 q_y'^2 + q_y'^2 q_z'^2 + q_z'^2 q_x'^2 - \frac{(3q'_x q'_y q'_z)^2}{Q^2} \right] |I(iq_z)|^2. \quad (3.21)$$

这里, $\epsilon(\mathbf{q}) = 1 - \sum_{q_z} v_Q |I(iq_z)|^2 \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - f_{\mathbf{k}\sigma}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}}$ 表示屏蔽, $v_Q = \frac{4\pi e^2}{Q^2}$ 是裸的库仑势, $Q^2 = \mathbf{q}^2 + q_z^2$, $|I(iq_z)|^2 = \pi^4 \sin^2 y / [y^2 (y^2 - \pi^2)^2]$ 代表形状因子, $y = q_z a / 2$, 此外, $q'_x = \frac{1}{\sqrt{6}} q_x - \frac{1}{\sqrt{2}} q_y + \frac{1}{\sqrt{3}} q_z$, $q'_y = \frac{1}{\sqrt{6}} q_x + \frac{1}{\sqrt{2}} q_y + \frac{1}{\sqrt{3}} q_z$, $q'_z = -\frac{2}{\sqrt{6}} q_x + \frac{1}{\sqrt{3}} q_z$ 。自旋翻转散射中子带间自旋混合 $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ 在附录 A.3 中给出。

通过数值求解动力学自旋 Bloch 方程可以得到自旋弛豫时间 (包括 DP 和 EY)。计算中用到的所有参数都在表 3-1 中给出, 初始自旋极化方向选在量子阱生长方向 (其它情况会特别说明), 初始自旋极化大小为 2.5 %。

表 3-1: 计算中用到的参数。摘自文献 [111]。

γ_1	6.85	γ_2	2.10	γ_3	2.90
b_{41}	-81.93 eVÅ ³	b_{42}	1.47 eVÅ ³	b_{51}	0.49 eVÅ ³
b_{52}	-0.98 eVÅ ³	D'_u	4.67 eV	a_{GaAs}	5.65 Å
a_{AlAs}	5.66 Å	a_{InP}	5.87 Å	C_{11}	11.81
C_{12}	5.32	C_{44}	5.94	d	5.31 g/cm ³
d_0	48 eV ^a	ω_{LO}	35.4 meV ^b	ω_{TO}	33.2 meV ^b
e_{14}	1.41×10^9 V/m ^c	κ_{∞}	10.8 ^c	Ξ	8.5 eV ^c
v_{sl}	5.29×10^3 m/s ^c	v_{st}	2.48×10^3 m/s ^c	κ_0	12.9 ^c

^a 取自文献 [243], ^b 取自文献 [93, 94], ^c 取自文献 [97], 其余参数取自文献 [86]。

3.3.3 数值结果

3.3.3.1 GaAs/AlAs 量子阱中的重空穴自旋弛豫

我们先来研究一下 (111) GaAs/AlAs 量子阱中的重空穴自旋弛豫。在数值求解动力学自旋 Bloch 方程之前，我们先从解析上来分析一下 DP 自旋弛豫。在强散射极限下（在我们的研究中始终满足）， z 方向自旋极化 S_z 的时间演化可用以下方程来近似描述

$$\dot{S}_z = -\tau_p^* [S_z \langle \Omega_x^2 + \Omega_y^2 \rangle - S_x \langle \Omega_x \Omega_z \rangle - S_y \langle \Omega_y \Omega_z \rangle], \quad (3.22)$$

τ_p^* 表示有效动量散射时间包括空穴-空穴、空穴-杂质以及空穴-声子散射的贡献 [87, 91–94, 100, 244, 245]， $\Omega_{x,y,z}$ 是总的自旋轨道耦合的三个分量。 S_x 和 S_y 的时间演化可以通过置换指标 ($x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$) 得到。由公式 (3.8) 和 (3.9) 可知， $\langle \Omega_x \Omega_y \rangle = \langle \Omega_y \Omega_z \rangle = 0$ 而 $\langle \Omega_x \Omega_z \rangle \neq 0$ ，上面的方程变为

$$\dot{S}_z = -\tau_p^* [S_z \langle \Omega_x^2 + \Omega_y^2 \rangle - S_x \langle \Omega_x \Omega_z \rangle], \quad (3.23)$$

$$\dot{S}_x = -\tau_p^* [S_x \langle \Omega_y^2 + \Omega_z^2 \rangle - S_z \langle \Omega_x \Omega_z \rangle], \quad (3.24)$$

$$\dot{S}_y = -\tau_p^* [S_y \langle \Omega_x^2 + \Omega_z^2 \rangle]. \quad (3.25)$$

通过严格求解可得

$$S_z = S_x(0) \frac{\langle \Omega_x \Omega_z \rangle}{u} (-e^{-\lambda_1 \tau_p^* t} + e^{-\lambda_2 \tau_p^* t}) + \frac{S_z(0)}{2u} [(\langle \Omega_x^2 - \Omega_z^2 \rangle + u) e^{-\lambda_1 \tau_p^* t} + (\langle \Omega_z^2 - \Omega_x^2 \rangle + u) e^{-\lambda_2 \tau_p^* t}], \quad (3.26)$$

$$S_x = \frac{S_x(0)}{2u} [(\langle \Omega_z^2 - \Omega_x^2 \rangle + u) e^{-\lambda_1 \tau_p^* t} + (\langle \Omega_x^2 - \Omega_z^2 \rangle + u) e^{-\lambda_2 \tau_p^* t}] + S_z(0) \frac{\langle \Omega_x \Omega_z \rangle}{u} (-e^{-\lambda_1 \tau_p^* t} + e^{-\lambda_2 \tau_p^* t}), \quad (3.27)$$

$$S_y = S_y(0) e^{-(\Omega_x^2 + \Omega_z^2) \tau_p^* t}, \quad (3.28)$$

其中 $\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}(\langle \Omega_x^2 + 2\Omega_y^2 + \Omega_z^2 \rangle \pm u)$ ， $u = \langle \Omega_x^2 \rangle + \langle \Omega_z^2 \rangle$ 。假设初始自旋极化分别沿着 x, y, z 方向并考虑到 $\langle \Omega_x^2 \rangle$ 、 $\langle \Omega_y^2 \rangle$ 以及 $\langle \Omega_x \Omega_z \rangle$ 都比 $\langle \Omega_z^2 \rangle$ 来得远小，我们可以近似得到 x, y, z 方向的自旋弛豫时间分别为

$$\tau_{s_x} = \tau_p^{*-1} \langle \Omega_x^2 + \Omega_y^2 + \Omega_z^2 \rangle^{-1}, \quad (3.29)$$

$$\tau_{s_y} = \tau_p^{*-1} \langle \Omega_x^2 + \Omega_z^2 \rangle^{-1}, \quad (3.30)$$

$$\tau_{s_z} = \tau_p^{*-1} \langle \Omega_y^2 \rangle^{-1}. \quad (3.31)$$

从这里我们看出 τ_{s_z} 可以非常长因为非均匀扩展 $\langle \Omega_y^2 \rangle$ 在相消电场 E_z^y 处会被非常强烈

地压制。此外，根据非均匀扩展的具体形式可知，平面外跟平面内的自旋弛豫可能具有很强的各向异性，平面内的 x 和 y 方向也有些轻微的各向异性。

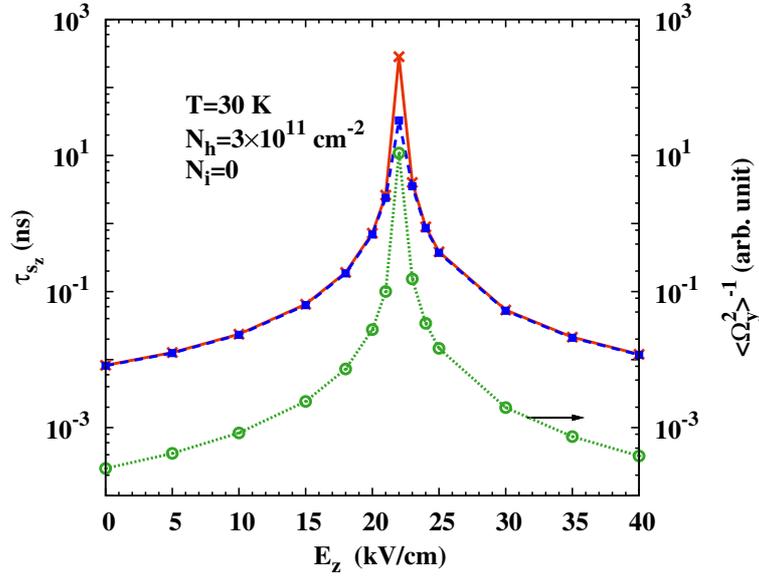


图 3-7: (111) GaAs/AlAs 量子阱中重空穴自旋弛豫时间 τ_{s_z} 和非均匀扩展的逆 $\langle \Omega_y^2 \rangle^{-1}$ 随外加电场的变化。红色实线（蓝色短划线）表示的是由 DP（DP 和 EY）机制导致的自旋弛豫时间。温度 $T = 30$ K，重空穴浓度 $N_h = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ，杂质浓度 $N_i = 0$ 。需要指出的是 $\langle \Omega_y^2 \rangle^{-1}$ 的标度在图中右侧。摘自文献 [111]。

接下来我们来看一下数值结果。我们先计算了 DP 自旋弛豫时间随外加电场的变化如图 3-7 中红色实线所示，外加电场可以非常有效地改变自旋弛豫时间，当电场 $E_z \approx 22$ kV/cm 的时候自旋弛豫时间呈现出一个峰值达到 283 ns，它比没有外加电场时的自旋弛豫时间大了四个量级。这个峰的出现是因为非均匀扩展 $\langle \Omega_y^2 \rangle$ 被很强地压制了如图 3-7 中绿色点线所示， $\langle \Omega_y^2 \rangle$ 被压制的根本原因在于当电场 $E_z \approx 22$ kV/cm 的时候总的自旋轨道耦合的 y 分量 Ω_y 中 Dresselhaus 和 Rashba 项 [参见公式 (3.8) 和 (3.9)] 几乎完全相消了。我们知道在 GaAs 块体材料中导致空穴自旋弛豫的主要机制是 EY 机制 [223]，为了搞清楚 EY 机制对我们这里研究的相消效应的影响，我们给出了由 DP 和 EY 机制共同引起的自旋弛豫时间对外加电场的依赖关系如图 3-7 中蓝色短划线所示。很明显，EY 机制只在相消电场附近比较重要，因为 DP 机制被非常强烈地压制了，尽管这样在相消电场处的自旋弛豫时间仍然能达到几十纳秒量级（比没有电场的时候大三个量级）。

DP 自旋弛豫被压制是由总的有效磁场的 y 分量在相消电场处几乎完全相消导致的，这种压制应该对空穴浓度、温度以及杂质浓度不敏感。在图 3-8 (a)-(c) 中，我们给出了在零电场（带有 \times 的红线）和相消电场 $E_z = 22$ kV/cm（带有 \square 的绿线）下 DP 自旋弛豫时间随空穴浓度、温度和杂质浓度的变化，可以看出相消电场下的

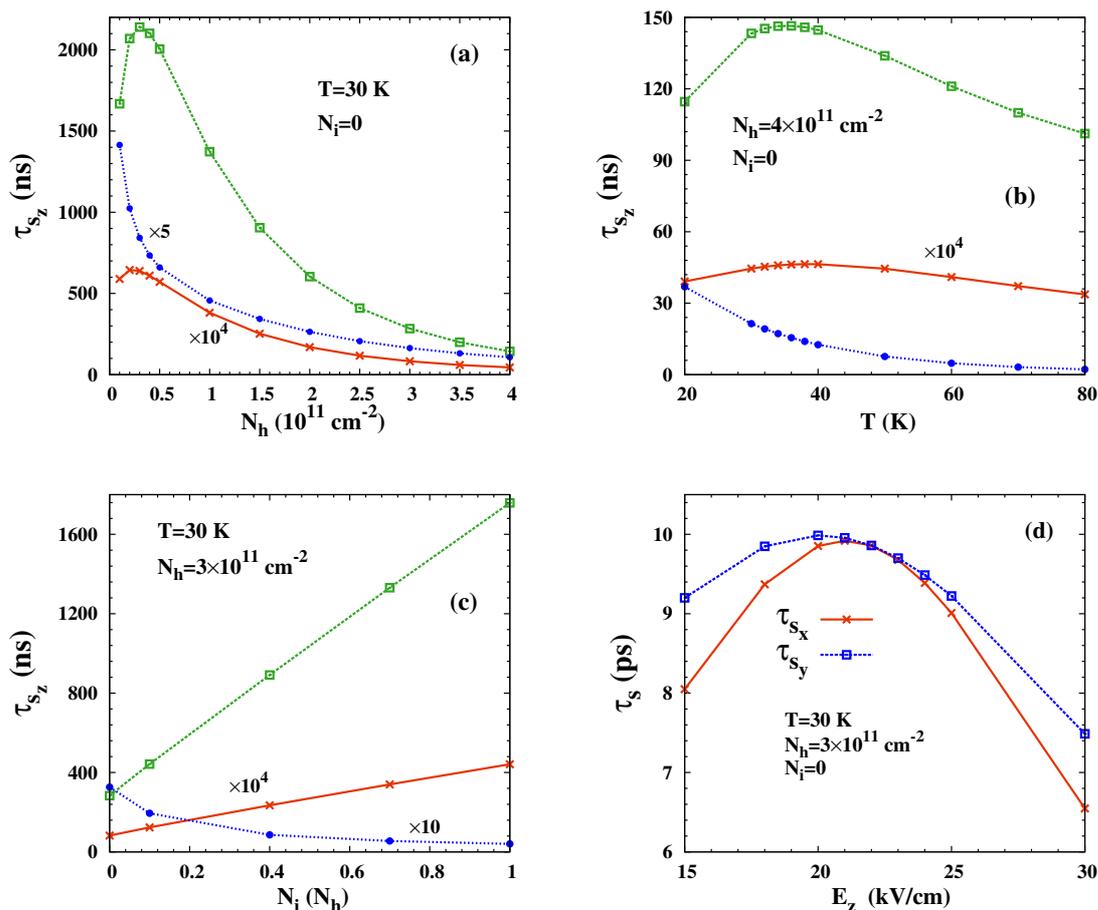


图 3-8: (111) GaAs/AlAs 量子阱中重空穴自旋弛豫时间 τ_{s_z} 对空穴浓度 (a)、温度 (b) 以及杂质浓度 (c) 的依赖关系。带有 \times 的红线表示零电场下的 DP 自旋弛豫时间，带有 \square 的绿线（带有 \bullet 的蓝线）代表在相消电场 $E_z = 22 \text{ kV/cm}$ 下由 DP（DP 和 EY）机制导致的自旋弛豫时间。参数如下，(a) $T = 30 \text{ K}$, $N_i = 0$; (b) $N_h = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $N_i = 0$; (c) $T = 30 \text{ K}$, $N_h = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。另外，(d) 重空穴自旋弛豫时间 τ_{s_x} 和 τ_{s_y} 随外加电场的变化。 $T = 30 \text{ K}$, $N_h = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $N_i = 0$ 。

自旋弛豫时间始终比零电场下的大四个量级。此外，我们在空穴浓度和温度依赖中都看到了库仑峰，峰的位置不随电场改变，这跟 (111) GaAs 量子阱中电子的情况一样 [103]。前面讲过 EY 机制在相消电场附近很重要，我们计算了电场 $E_z = 22 \text{ kV/cm}$ 下由 DP 和 EY 机制共同导致的自旋弛豫时间用带有 \bullet 的蓝线表示。空穴浓度和温度依赖中的峰消失了，这是因为 EY 自旋弛豫时间随空穴浓度增大/温度升高而变小 [7, 223]。

最后，我们来研究一下自旋弛豫的各向异性。自旋弛豫时间 τ_{s_x} 和 τ_{s_y} 对外加电场的依赖关系如图 3-8 (d) 所示，虽然也出现了一个峰但峰值要比 τ_{s_z} 的 (见图 3-7) 小三个量级左右，平面内和平面外的自旋弛豫表现出非常强的各向异性。原因在于平面外自旋感受到的非均匀扩展 $\langle \Omega_y^2 \rangle$ 可以很强地被压制但平面内自旋的非均匀扩展 (x 方向为 $\langle \Omega_x^2 + \Omega_y^2 + \Omega_z^2 \rangle$, y 方向为 $\langle \Omega_x^2 + \Omega_z^2 \rangle$) 由于 Ω_z 的存在很难被压制。

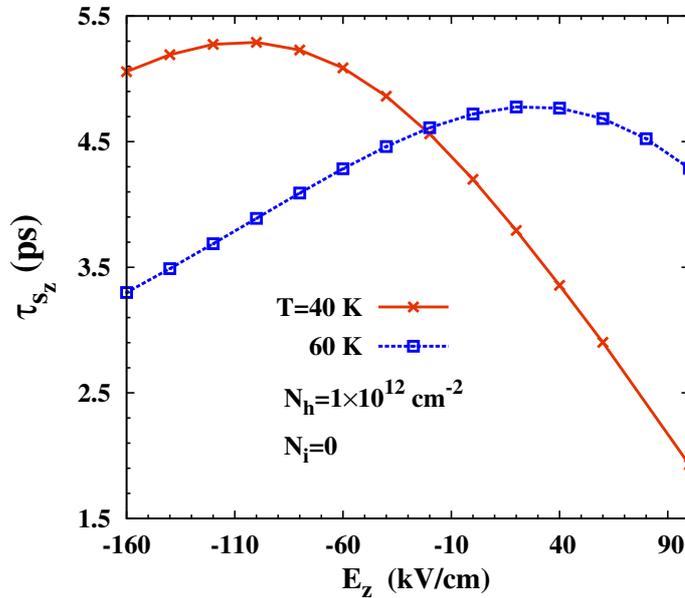


图 3-9: (111) GaAs/InP 量子阱中轻空穴自旋弛豫时间 τ_{s_z} 随外加电场的变化。带有 \times 的红线 (带有 \square 的蓝线) 表示温度 $T = 40$ (60) K 的情况。轻空穴浓度 $N_h = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, 杂质浓度 $N_i = 0$ 。摘自文献 [111]。

3.3.3.2 GaAs/InP 量子阱中的轻空穴自旋弛豫

我们还研究了 (111) GaAs/InP 量子阱中轻空穴的自旋弛豫。图 3-9 中给出了不同温度下 DP 自旋弛豫时间 τ_{s_z} 随外加电场的变化，我们看到了一个峰跟重空穴的情况类似，但是这里的峰跟重空穴的相比很不明显，原因在于轻空穴的自旋轨道耦合的平面内分量只能在某一特殊的动量圈上严格相消 [参见公式 (3.12) 和 (3.13)]，相消明显比重空穴的减弱很多。另外，当温度升高的时候，峰的位置会移动，这跟 (111) GaAs 量子阱中电子的情况很类似 [103]。最后需要指出的是 EY 机制导致的轻空穴自旋弛豫时间在 10 ns 量级，远长于 DP 自旋弛豫时间因此可以忽略不计。

3.4 小结

在本章中我们讨论了 (111) GaAs 量子阱中电子以及轻重空穴的自旋弛豫。在 (111) GaAs 量子阱中，电子和轻重空穴的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的平面内分量都能发生相消，电子和轻空穴的只能在某一特殊的动量圈上严格相消而重空穴的在整个动量空间几乎可以完全相消。不同的相消方式对自旋弛豫的影响很不一样。对电子和轻空穴而言，相消对温度非常敏感，它只有在低温下比较明显导致较长的 DP 自旋弛豫时间，随着温度升高电子和轻空穴会在动量空间扩展开来，相消会越来越不明显对 DP 自旋弛豫的抑制也越来越弱。对重空穴而言，相消对温度很不敏感，无论温度高低 DP 自旋弛豫始终被非常强烈地压制，自旋弛豫时间比没有电场的时候大四个量级左右。因此，相比于电子和轻空穴而言，重空穴在实现自旋电子学器件方面具有更广阔的应用前景。上面提到的自旋弛豫时间都是指自旋极化沿着平面外方向的，对于自旋极化在平面内的情况，自旋弛豫会快很多，这是因为自旋轨道耦合的平面外分量很难发生相消。

目前已经有一些实验研究了 (111) GaAs 量子阱中电子的自旋弛豫，他们发现通过改变外加电场可以非常有效地调节自旋弛豫时间，在相消电场处自旋弛豫时间达到峰值，在低温 (50 K) 下该峰值比没有电场的时候大两个量级，在高温 (250 K) 下峰值只比没有电场的时候大几倍，这些实验结果跟理论预期的非常一致。(111) GaAs 量子阱中空穴的自旋弛豫还没有被实验报道过，我们希望将来有实验能够关注空穴尤其是重空穴的自旋弛豫，因为重空穴中的相消远比电子的来得显著。

第四章 双层石墨烯中的电子自旋弛豫

在章节 1.2.3 中我们已经介绍了双层石墨烯中自旋弛豫的研究现状。这一章讲一下我们自己在这方面的理论研究工作 [170]。平面外（垂直于双层石墨烯平面）的外加电场可以诱导出 Rashba 自旋轨道耦合，它的平面外分量的主导项提供的有效磁场在两个能谷中大小相等方向相反，我们称该主导项为类 Zeeman 项。类 Zeeman 项可以提供谷间非均匀扩展，跟谷间散射包括谷间电子-声子和谷间短程杂质散射一起打开 DP 机制下的一个谷间自旋弛豫通道。我们发现谷间电子-声子散射在高温下可以非常显著地加快双层石墨烯中的电子自旋弛豫，自旋弛豫时间最小可以达到几百皮秒左右，跟实验测量值可比拟。而谷间短程杂质散射对温度不敏感，可以在低温下对自旋弛豫起着非常重要的作用。接下来我们先在理论上仔细研究一下谷间自旋弛豫机制对电子自旋弛豫的影响，然后再用我们的理论模型跟实验做一个详细的比较。

4.1 哈密顿量

我们研究的体系为生长在 SiO₂ 衬底上 AB 堆叠的双层石墨烯，它的晶格结构如图 1-12 左图所示。在不考虑自旋自由度的时候，体系可以用一个有效的 4 × 4 哈密顿量来描述 [179]

$$H_{\text{TB}}(\tilde{\mathbf{k}}) = \begin{pmatrix} \Delta + V & \gamma_0 f(\tilde{\mathbf{k}}) & \gamma_4 f^*(\tilde{\mathbf{k}}) & \gamma_1 \\ \gamma_0 f^*(\tilde{\mathbf{k}}) & +V & \gamma_3 f(\tilde{\mathbf{k}}) & \gamma_4 f^*(\tilde{\mathbf{k}}) \\ \gamma_4 f(\tilde{\mathbf{k}}) & \gamma_3 f^*(\tilde{\mathbf{k}}) & -V & \gamma_0 f(\tilde{\mathbf{k}}) \\ \gamma_1 & \gamma_4 f(\tilde{\mathbf{k}}) & \gamma_0 f^*(\tilde{\mathbf{k}}) & \Delta - V \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

这里基的顺序依次为 $\Psi_{A_1}(\tilde{\mathbf{k}})$, $\Psi_{B_1}(\tilde{\mathbf{k}})$, $\Psi_{A_2}(\tilde{\mathbf{k}})$, $\Psi_{B_2}(\tilde{\mathbf{k}})$ ，其中 A₁, B₁ 表示下层的两个代表格点，A₂, B₂ 代表上层的两个代表格点， $\tilde{\mathbf{k}}$ 是一个以 Γ 点为零点的二维波矢。 γ_0 和 γ_1 分别表示最近邻的层内和层间跃迁而 $\gamma_{3,4}$ 描述的是层间间接跃迁， Δ 是由层间跃迁导致的格点能的能量修正， $V = eE_z d_{\text{eff}}/2$ 为电势能，来源于平面外的外加电场 E_z ， $f(\tilde{\mathbf{k}}) = e^{i\frac{a}{\sqrt{3}}\tilde{k}_y} [1 + 2e^{-i\frac{\sqrt{3}a}{2}\tilde{k}_y} \cos(\frac{a}{2}\tilde{k}_x)]$ ， a 表示双层石墨烯的晶格常数。

在 Dirac 点 (K 和 K') 附近，只保留动量 \mathbf{k} （以 K 或者 K' 为零点）的线性项， $f(\tilde{\mathbf{k}}) \equiv p(\mathbf{k}) = -\sqrt{3}a(\mu k_x - ik_y)/2$ ， $\mu = 1 (-1)$ 对应 $K (K')$ 谷。前面给出的哈密

顿量 [公式 (4.1)] 在 Dirac 点附近可以写成

$$H^\mu(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \Delta + V & \gamma_0 p & \gamma_4 p^* & \gamma_1 \\ \gamma_0 p^* & +V & \gamma_3 p & \gamma_4 p^* \\ \gamma_4 p & \gamma_3 p^* & -V & \gamma_0 p \\ \gamma_1 & \gamma_4 p & \gamma_0 p^* & \Delta - V \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

通过严格对角化这个哈密顿量，我们可以得到本征值 $\epsilon_{\mu\nu\mathbf{k}}$ 和相应的本征态 $\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\nu}$ ， ν 是能带指标包括两个导带以及两个价带。最高的导带和价带由于能量很高可以不用考虑，对于剩下的导带和价带而言，当体系的费米面较高的时候也可以近似地只考虑一个带的贡献，这里我们考虑的是只有最低导带参与的情况，为了方便起见，我们将最低导带的本征值和本征态分别缩记为 $\epsilon_{\mu\mathbf{k}}$ 和 $\psi_{\mathbf{k}}^\mu$ 。

考虑进自旋自由度后，双层石墨烯最低导带的有效哈密顿量具有以下形式

$$H_{\text{eff}}^\mu = \epsilon_{\mu\mathbf{k}} + \boldsymbol{\Omega}^\mu(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}/2, \quad (4.3)$$

这里， $\boldsymbol{\sigma}$ 是自旋空间的泡利矩阵， $\boldsymbol{\Omega}^\mu(\mathbf{k})$ 表示 Rashba 自旋轨道耦合提供的有效磁场，它是在 Kanschuh 等人 [179] 第一性原理计算和紧束缚模型结果的基础上计算得到的，具体的计算细节参见附录 B。这里得到的只是自旋轨道耦合的数值结果，很难简单直观地反映自旋轨道耦合的性质，为了解决这个问题，我们从对称性出发构造了自旋轨道耦合的解析形式如下

$$\Omega_x^\mu(\mathbf{k}) = \alpha_1(k) \sin \theta_{\mathbf{k}} + \mu[\alpha_2(k) \sin 2\theta_{\mathbf{k}} + \alpha_3(k) \sin 4\theta_{\mathbf{k}}], \quad (4.4)$$

$$\Omega_y^\mu(\mathbf{k}) = -\alpha_1(k) \cos \theta_{\mathbf{k}} + \mu[\alpha_2(k) \cos 2\theta_{\mathbf{k}} - \alpha_3(k) \cos 4\theta_{\mathbf{k}}], \quad (4.5)$$

$$\Omega_z^\mu(\mathbf{k}) = \mu\beta_1(k) + \beta_2(k) \cos 3\theta_{\mathbf{k}}, \quad (4.6)$$

其中， k 和 $\theta_{\mathbf{k}}$ 分别为动量 \mathbf{k} 的大小和极角，自旋轨道耦合系数 $\alpha_i(k)$ ($i = 1-3$) 和 $\beta_{1,2}(k)$ 是通过拟合前面计算得到的数值结果确定下来的，具体形式在附录 B 中给出。从自旋轨道耦合的解析形式可以看出平面外分量的主导项 $\mu\beta_1(k)$ 扮演着一个类 Zeeman 项的角色即在两个谷中具有大小相等方向相反的有效磁场，这跟前面讲过的弯曲的单层石墨烯中的情况很类似 [158]。类 Zeeman 项跟谷间散射一起可以打开 DP 机制下的一个谷间自旋驰豫通道，它对平面内的自旋驰豫可能起着非常重要的作用。虽然自旋轨道耦合的平面内分量中也存在类 Zeeman 项，但这些项是动量的高阶项对平面外自旋驰豫的贡献可以忽略，这就意味着体系的平面内和平面外自旋驰豫之间可能有非常强的各向异性。

4.2 双层石墨烯中的动力学自旋 Bloch 方程

我们利用动力学自旋 Bloch 方程来研究双层石墨烯中的电子自旋弛豫 [7]。方程的具体形式在章节 2.1 中已经详细介绍了，这里只介绍一下我们研究体系中的一些相关细节。在我们的计算中动力学自旋 Bloch 方程包括相干进动项和所有相关的散射项，其中相干进动项中考虑了自旋轨道耦合和库仑 Hartree-Fock 自能 $\hat{\Sigma}_{\mu\mathbf{k}}^{\text{HF}} = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\mu} I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mu} \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}'}$ [93,95] 的贡献， $I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mu} = |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} \psi_{\mathbf{k}'}^{\mu}|^2$ 为形状因子， $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\mu} = V_{\mathbf{q}}^{(0)}/\varepsilon(\mathbf{q}, \epsilon_{\mu\mathbf{k}} - \epsilon_{\mu\mathbf{k}-\mathbf{q}})$ 是屏蔽后的库仑势， $\varepsilon(\mathbf{q}, \epsilon_{\mu\mathbf{k}} - \epsilon_{\mu\mathbf{k}-\mathbf{q}}) = 1 - V_{\mathbf{q}}^{(0)}\Pi(\mathbf{q}, \epsilon_{\mu\mathbf{k}} - \epsilon_{\mu\mathbf{k}-\mathbf{q}})$ 表示随机相位近似下的屏蔽 [246]，裸的二维库仑势为 $V_{\mathbf{q}}^{(0)} = 2\pi v_{\text{F}} r_s / q$ ， $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ 的形式为 [104, 220–222]

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mu\mathbf{k}\nu\nu's} |T_{\mathbf{k}\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu\nu\nu'}|^2 \frac{f_{\mathbf{k}s}^{\mu\nu} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^{\mu\nu'}}{\epsilon_{\mu\nu\mathbf{k}} - \epsilon_{\mu\nu'\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega + i0^+}, \quad (4.7)$$

其中 $T_{\mathbf{k}\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu\nu\nu'} = \psi_{\mathbf{k}}^{\mu\nu\dagger} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu\nu'}$ 。

散射项包括了电子-电子库仑散射 ($|V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\mu}|^2$)，长程电子-杂质散射 ($|U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\mu}|^2$)，谷内电子-声学声子散射 ($|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{AC}}|^2$)，谷内电子-光学声子散射 ($|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{OP}}|^2$)，谷内电子-远程界面声子散射 ($|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{RI}}|^2$) 以及谷间电子-声子散射，其中谷间电子-声子散射又包括了电子-KA₁' 声子 ($|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KA}'_1}|^2$)、电子-KA₂' 声子 ($|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KA}'_2}|^2$)、电子-KE' 声子 ($|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KE}'}|^2$) 以及电子-KZ 声子 ($|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KZ}}|^2$) 散射。KA₁'，KA₂' 和 KE' 是平面内振动的声子模分别对应于对称点群 D_{3h} 的不可约表示 A'_1 ， A'_2 以及 E' ，KZ 表示的是平面外振动的声子模 [247–250]。这里需要指出的是谷内电子-声子散射在之前的文献中已经有过报道了 [247, 251]，但是据我们所知，谷间电子-声子散射还没有被研究过，这里的谷间电子-声子散射项是我们自己根据文献 [251] 对应的 arXiv 版本从紧束缚模型出发推导得到

的。接下来我们给出散射矩阵元的形式，

$$|U_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\mu|^2 = Z_i^2 |V_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\mu|^2, \quad (4.8)$$

$$|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{AC}}|^2 = D_{\text{AC}}^2 |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| / (2\rho v_{\text{ph}}) I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\mu \delta_{\mu\mu'}, \quad (4.9)$$

$$|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{RI}}|^2 = g \frac{\sqrt{3}v_F^2}{a} \frac{e^{-2qd}}{q + 4r_s k_F} I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\mu \delta_{\mu\mu'}, \quad (4.10)$$

$$|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{OP,LT}}|^2 = \frac{9}{2\rho\Omega_{\text{LT}}} \delta_{\mu\mu'} \left\{ |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} [\gamma'_0 (\sin\theta_{\mathbf{q}}\sigma_{\text{D}}^{23} + \cos\theta_{\mathbf{q}}\sigma_{\text{D}}^{13}) - a\gamma'_3 (\sin\theta_{\mathbf{q}}\gamma_{\text{D}}^1\gamma_{\text{D}}^5 - i\sin\theta_{\mathbf{q}}\gamma_{\text{D}}^2 + i\cos\theta_{\mathbf{q}}\gamma_{\text{D}}^1 + \cos\theta_{\mathbf{q}}\gamma_{\text{D}}^2\gamma_{\text{D}}^5) / (2\sqrt{3}l_3)] \psi_{\mathbf{k}'}^\mu|^2 + |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} [i\gamma'_0 (\sin\theta_{\mathbf{q}}\sigma_{\text{D}}^{01} - \cos\theta_{\mathbf{q}}\sigma_{\text{D}}^{02}) + a\gamma'_4 (i\cos\theta_{\mathbf{q}}\gamma_{\text{D}}^3 - \sin\theta_{\mathbf{q}}\gamma_{\text{D}}^3\gamma_{\text{D}}^5) / (\sqrt{3}l_4)] \psi_{\mathbf{k}'}^\mu|^2 + |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} [\gamma'_0 (\cos\theta_{\mathbf{q}}\sigma_{\text{D}}^{23} - \sin\theta_{\mathbf{q}}\sigma_{\text{D}}^{13}) - a\gamma'_3 (\cos\theta_{\mathbf{q}}\gamma_{\text{D}}^1\gamma_{\text{D}}^5 - i\cos\theta_{\mathbf{q}}\gamma_{\text{D}}^2 - i\sin\theta_{\mathbf{q}}\gamma_{\text{D}}^1 - \sin\theta_{\mathbf{q}}\gamma_{\text{D}}^2\gamma_{\text{D}}^5) / (2\sqrt{3}l_3)] \psi_{\mathbf{k}'}^\mu|^2 + |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} [i\gamma'_0 (\cos\theta_{\mathbf{q}}\sigma_{\text{D}}^{01} + \sin\theta_{\mathbf{q}}\sigma_{\text{D}}^{02}) - a\gamma'_4 \gamma_{\text{D}}^3 (i\sin\theta_{\mathbf{q}} + \cos\theta_{\mathbf{q}}\gamma_{\text{D}}^5) / (\sqrt{3}l_4)] \psi_{\mathbf{k}'}^\mu|^2 \right\}, \quad (4.11)$$

$$|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{OP,ZO}}|^2 = \frac{\gamma_1'^2}{2\rho\Omega_{\text{ZO}}} \delta_{\mu\mu'} |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} (\gamma_{\text{D}}^1\gamma_{\text{D}}^5 + i\gamma_{\text{D}}^2) \psi_{\mathbf{k}'}^\mu|^2, \quad (4.12)$$

$$|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KA}'_1}|^2 = \frac{3}{4\rho\Omega_{\text{KA}'_1}} \delta_{\mu',-\mu} \left[|\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} (2\sqrt{3}\gamma'_0\sigma_{\text{D}}^{23} + a\gamma'_4\gamma_{\text{D}}^0/l_4) \psi_{\mathbf{k}'}^{\mu'}|^2 + |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} (2\sqrt{3}i\gamma'_0\sigma_{\text{D}}^{01} - a\gamma'_4\gamma_{\text{D}}^3\gamma_{\text{D}}^5/l_4) \psi_{\mathbf{k}'}^{\mu'}|^2 \right], \quad (4.13)$$

$$|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KA}'_2}|^2 = \frac{3a^2\gamma_4'^2}{4\rho l_4^2 \Omega_{\text{KA}'_2}} \delta_{\mu',-\mu} \left(|\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} \gamma_{\text{D}}^3 \gamma_{\text{D}}^5 \psi_{\mathbf{k}'}^{\mu'}|^2 + |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} \gamma_{\text{D}}^0 \psi_{\mathbf{k}'}^{\mu'}|^2 \right), \quad (4.14)$$

$$|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KE}'}|^2 = \frac{3a^2}{4\rho l_4^2 \Omega_{\text{KE}'}} \delta_{\mu',-\mu} \left[|\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} (\gamma'_3\gamma_{\text{D}}^1\gamma_{\text{D}}^5 - i\gamma'_3\gamma_{\text{D}}^2 - \gamma'_4\gamma_{\text{D}}^0) \psi_{\mathbf{k}'}^{\mu'}|^2 + |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} (i\gamma'_3\gamma_{\text{D}}^2 - \gamma'_3\gamma_{\text{D}}^1\gamma_{\text{D}}^5 - \gamma'_4\gamma_{\text{D}}^0) \psi_{\mathbf{k}'}^{\mu'}|^2 + 4|\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} \gamma'_4\gamma_{\text{D}}^3\gamma_{\text{D}}^5 \psi_{\mathbf{k}'}^{\mu'}|^2 \right], \quad (4.15)$$

$$|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KZ}}|^2 = \frac{\gamma_1'^2}{2\rho\Omega_{\text{KZ}}} \delta_{\mu',-\mu} |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} (\gamma_{\text{D}}^1\gamma_{\text{D}}^5 + i\gamma_{\text{D}}^2) \psi_{\mathbf{k}'}^{\mu'}|^2, \quad (4.16)$$

LT 和 ZO 分别表示平面内和平面外振动的光学声子模， $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ ，相关的 Dirac 矩阵为

$$\gamma_{\text{D}}^0 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_{\text{D}}^5 = \begin{pmatrix} -I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad \sigma_{\text{D}}^{01} = -i \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{pmatrix}, \quad \sigma_{\text{D}}^{13} = - \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix},$$

$$\sigma_{\text{D}}^{02} = -i \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \end{pmatrix}, \quad \sigma_{\text{D}}^{23} = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}, \quad \gamma_{\text{D}}^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (i = 1-3).$$

除了上面给出的散射外，我们在与实验结果做比较的时候（参见章节 4.3.2）还考虑了短程杂质引起的谷内谷间散射，散射项的具体形式为 [252]

$$\partial_t \hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}}|_{\text{SR}} = -\pi n_d V_0^2 \sum_{\mu'\mathbf{k}'} |\psi_{\mathbf{k}}^{\mu\dagger} \psi_{\mathbf{k}'}^{\mu'}|^2 \delta(\epsilon_{\mu'\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mu\mathbf{k}}) (\hat{\rho}_{\mu\mathbf{k}} - \hat{\rho}_{\mu'\mathbf{k}'}) + \text{H.c.}, \quad (4.17)$$

n_d 和 V_0 分别表示短程杂质浓度和短程杂质势的强度。

表 4-1: 计算中用到的参数, E_z^* 是外加电场 E_z 以 V/nm 为量纲时的数值。摘自文献 [170]。

Δ	9.7 meV	γ_0	2.6 eV
γ_1	0.339 eV	γ_3	0.28 eV
γ_4	-0.14 eV	λ_{11}	12 μeV
λ_{12}	10 μeV	λ_0	$(5 + 10E_z^*) \mu\text{eV}$
λ'_0	$(5 - 10E_z^*) \mu\text{eV}$	λ_3	$1.5E_z^* \mu\text{eV}$
λ_4	$(-12 - 3E_z^*) \mu\text{eV}$	λ'_4	$(-12 + 3E_z^*) \mu\text{eV}$
a	2.46 Å	d_{eff}	0.1 nm
d	0.4 nm ^a	r_s	0.8 ^a
v_F	8×10^5 m/s ^b	v_{ph}	2×10^4 m/s ^a
D_{AC}	15 eV ^c	ρ	1.52×10^{-7} g/cm ² ^d
ω_1^{RI}	59 meV ^a	ω_2^{RI}	155 meV ^a
g_1	5.4×10^{-3} ^a	g_2	3.5×10^{-2} ^a
Ω_{LT}	196 meV ^a	Ω_{ZO}	104 meV ^c
γ'_0	4.4 eV/Å ^e	γ'_1	0.61 eV/Å ^e
γ'_3	0.54 eV/Å ^e	γ'_4	0.3 eV/Å ^e
$\Omega_{\text{KA}'_1}$	161.2 meV	$\Omega_{\text{KA}'_2}$	125 meV ^c
$\Omega_{\text{KE}'}$	152 meV ^c	Ω_{KZ}	65 meV ^c
l_3	3.64 Å	l_4	3.64 Å
Z_i	1		

^a 取自文献 [104], ^b 取自文献 [253], ^c 取自文献 [247], ^d 取自文献 [251], ^e 取自文献 [254], 其余参数取自文献 [179]。

通过严格数值求解动力学自旋 Bloch 方程可以得到双层石墨烯中的 DP 自旋弛豫时间。计算中用到的所有参数都在表 4-1 中给出, 初始自旋极化方向选在平面内比如说 x 方向 (平面内自旋弛豫是各向同性的), 其它自旋取向会特别说明, 初始自旋极化大小为 2.5 %。这里需要指出的是我们分别用数值和解析上得到的自旋轨道耦合计算了自旋弛豫时间, 发现两者吻合得非常好。

4.3 数值结果

4.3.1 高迁移率的双层石墨烯中的自旋弛豫

这一章节中我们来研究一下高迁移率的双层石墨烯中的电子自旋弛豫, 包括自旋弛豫对温度、浓度和初始自旋极化的依赖以及自旋弛豫的各向异性。在我们的计算中, 外加电场选取为实验上的典型值 $E_z = 0.14$ V/nm [147], 长程杂质浓度为 $N_i = 1.5 \times 10^{11}$ cm⁻², 相应的迁移率在 10^4 cm²/(Vs) 量级, 比自旋输运实验中测量

到的迁移率要大一到两个量级 [147, 148, 180]。需要说明的是这一章节中我们没有考虑短程杂质的影响。

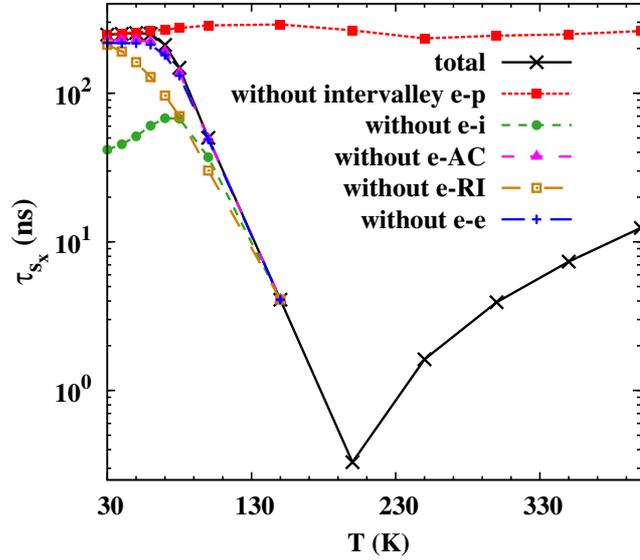


图 4-1: 自旋弛豫时间 τ_{s_x} 随温度 T 的变化。 \times 中包括了所有散射的贡献而 \bullet , \blacktriangle , \square , $+$, \blacksquare 中分别去掉了长程电子-杂质散射, 电子-声学声子散射, 电子-远程声子散射, 电子-电子库仑散射, 谷间电子-声子散射。需要指出的是当 $T > 150$ K 的时候, \bullet , \blacktriangle , \square 和 $+$ 中的结果跟总的自旋弛豫时间几乎重合, 因而没有在图中给出。电子浓度 $N_e = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 。摘自文献 [170]。

4.3.1.1 自旋弛豫对温度的依赖

我们先来看一下自旋弛豫的温度依赖关系。图 4-1 中我们给出了自旋弛豫时间 τ_{s_x} 随温度的变化, 在低温的时候 ($T \leq 60$ K) 自旋弛豫时间几乎不随温度变化, 当温度升高后自旋弛豫时间迅速减小, 在 $T = 200$ K 的时候达到最小值约为几百皮秒, 这跟实验测量值可比拟。当温度进一步升高后自旋弛豫时间开始变大。

为了理解自旋弛豫的行为, 我们在图 4-1 中分别给出了去掉长程电子-杂质散射 (\bullet), 电子-声学声子散射 (\blacktriangle), 电子-远程声子散射 (\square), 电子-电子库仑散射 ($+$), 谷间电子-声子散射 (\blacksquare) 后的自旋弛豫时间随温度的变化。通过比较可以发现, 在低温下谷间电子-声子散射可以忽略不计, 自旋弛豫时间完全由谷内自旋弛豫通道决定, 具体来说, 长程电子-杂质散射占主导地位使得自旋弛豫时间对温度不敏感 [104, 158]。随着温度的升高, 长程电子-杂质散射变得越来越不重要而谷间电子-声子散射变得越来越重要在 100 K 左右的时候开始占据主导地位。谷间电子-声子散射跟类 Zeeman 项 [参见公式 (4.6)] 一起可以导致谷间自旋弛豫, 跟弯曲的单层石墨烯中的情况类似 [158]。这个谷

间自旋弛豫通道可以近似地用以下方程来描述 [158]

$$\dot{\mathbf{S}}_{\mu k}(t) + \mathbf{S}_{\mu k}(t) \times \boldsymbol{\omega}_{\mu k} + \frac{\mathbf{S}_{\mu k}(t) - \mathbf{S}_{-\mu k}(t)}{\tau_v(k)} = 0, \quad (4.18)$$

其中 $\mathbf{S}_{\mu k}$, $\boldsymbol{\omega}_{\mu k} = [\mu\beta_1(k)]\hat{\mathbf{z}}$ 和 $\tau_v(k)$ 分别表示每个谷中的平面内自旋矢量, 沿着 z 方向的自旋进动矢量以及谷间电子-声子散射时间。通过求解方程可得平面内的自旋弛豫时间为

$$\tau_{s_{x,y}}(k) = \begin{cases} \tau_v(k) & \text{弱散射极限 } (|\beta_1(k)|\tau_v(k) \geq 1) \\ \frac{2}{|\beta_1(k)|^2\tau_v(k)} & \text{强散射极限 } (|\beta_1(k)|\tau_v(k) \ll 1) \end{cases} \quad (4.19)$$

这里, τ_{s_y} 表示 y 方向的自旋弛豫时间, 跟 x 方向的相同, 表明平面内的自旋弛豫是各向同性的。由于我们研究的系统始终在简并区, 可以近似地认为 $\tau_{s_{x,y}}(k) \approx \tau_{s_{x,y}}(k_F)$, k_F 是费米波矢。当温度 $T = 100$ K 的时候, $|\beta_1(k_F)|\tau_v(k_F) \approx 160$, 谷间电子-声子散射处在弱散射极限下, 自旋弛豫时间为 $\tau_{s_x} = \tau_v(k_F)$ [参见公式 (4.19)], 当温度升高的时候谷间散射增强自旋弛豫时间变小。当 $T = 400$ K 的时候, $|\beta_1(k_F)|\tau_v(k_F) \approx 0.04$, 谷间散射处在强散射极限下, 自旋弛豫时间为 $\tau_{s_x} = 2/[|\beta_1(k_F)|^2\tau_v(k_F)]$ [参见公式 (4.19)], 它随温度的升高而变大。因此, 当温度从 100 K 升高到 400 K 的时候, 谷间散射从弱散射极限变到强散射极限, 自旋弛豫时间相应地先减小后变大, 在强弱散射交叉处 $[\tau_v(k_F)^{-1} \approx |\beta_1(k_F)|]$ 达到最小 $[\tau_{s_x} \approx |\beta_1(k_F)|^{-1}]$ 约为 315 ps, 跟图中给出的数值结果 330 ps 非常接近。最后需要指出的是在我们计算的温度范围内电子-电子库仑散射对自旋弛豫的贡献几乎可以忽略, 这跟半导体 [7] 以及单层石墨烯 [104] 中的情况很不一样。

4.3.1.2 自旋弛豫对电子浓度的依赖

接下来我们研究一下自旋弛豫时间的电子浓度依赖关系。图 4-2 中左图给出了自旋弛豫时间在温度 $T = 100$ (300) K 时随电子浓度的变化, 在 $T = 100$ K 的时候 (\times) 我们发现了一个峰但在 $T = 300$ K 的时候 (\circ), 自旋弛豫时间随电子浓度的增加而单调变大。我们先来看一下 $T = 100$ K 的情况, 为了帮助理解自旋弛豫的行为, 我们计算了去掉谷间电子-声子散射后的自旋弛豫时间 (\square)。通过比较可以发现当电子浓度较低的时候谷间电子-声子散射不重要, 自旋弛豫时间是由谷内自旋弛豫通道决定的, 当电子浓度增加的时候, 非均匀扩展减小使得自旋弛豫时间变长 [7]。非均匀扩展的压制来源于自旋劈裂随动量的变大而减小如图 4-2 中右图所示。当电子浓度进一步增加后, 谷间电子-声子散射起主要作用。此时谷间散射处在弱散射区 $[|\beta_1(k_F)|\tau_v(k_F) \geq 40]$, 自旋弛豫时间为 $\tau_{s_x} = \tau_v(k_F)$ [参见公式 (4.19)], 当浓度增加的时候谷间散射会增强而自旋弛豫时间会减小。因此在我们计算的浓度范围内可以看到一个峰。需要指出的是这个峰跟 Jiang 和 Wu 在半导体中预言的很不一样 [102], 半导体中的浓度峰来源于非简并到

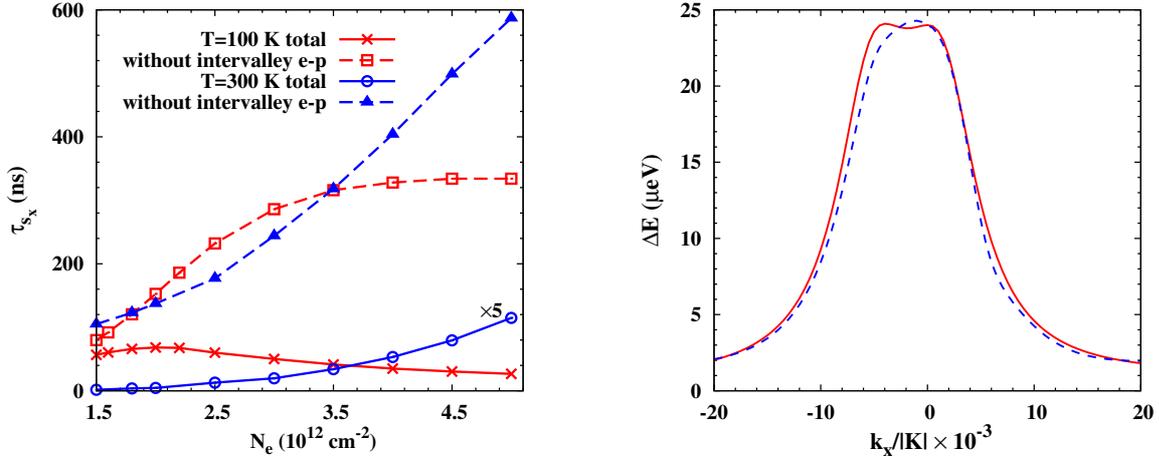


图 4-2: 左图: 自旋弛豫时间 τ_{s_x} 在 $T = 100$ (300) K 时随电子浓度的变化, \times (\circ) 表示总的自旋弛豫时间而 \square (\blacktriangle) 中没有考虑谷间电子-声子散射。右图: 在 Dirac 点附近最低导带的自旋劈裂随动量 k_x 的变化, 电场 $E_z = 0.14$ V/nm。实线和短划线分别表示数值和解析结果。摘自文献 [170]。

简并极限的交叉。

至于 $T = 300$ K 的情况, 谷间电子-声子散射始终占主导地位。此时谷间散射处在强散射区 [$|\beta_1(k_F)|\tau_v(k_F) \leq 0.75$], 自旋弛豫时间为 $\tau_{s_x} = 2/|\beta_1(k_F)|^2\tau_v(k_F)$ [参见公式 (4.19)], 随着电子浓度的增加 $|\beta_1(k_F)|$ 和 $\tau_v(k_F)$ 都减小 [158, 179], 自旋弛豫时间变长。

4.3.1.3 初始自旋极化对自旋弛豫的影响

图 4-3 中我们给出了在 $T = 100$ (\blacktriangle) 和 300 K (\blacktriangledown) 时自旋弛豫时间 τ_{s_x} 对初始自旋极化的依赖关系, 可以看出随着初始自旋极化变大, 自旋弛豫时间在 $T = 100$ K 的时候快速减小但在 $T = 300$ K 的时候却轻微变大, 两者形成鲜明的对比。自旋弛豫时间在 $T = 100$ K 时的快速减小跟之前半导体 [93, 95, 219, 232] 和单层石墨烯 [104] 中自旋弛豫时间的明显变长很不相同。在半导体和单层石墨烯中自旋弛豫时间的变长来源于库仑 Hartree-Fock 项的贡献 [93, 95], 这一项可以提供沿着自旋极化方向的有效磁场, 从而抑制自旋轨道耦合引起的非均匀扩展减缓自旋弛豫。但是在我们的研究的双层石墨烯中库仑 Hartree-Fock 项对自旋弛豫的贡献可以忽略, 这可以通过比较图 4-3 中总的自旋弛豫时间 (\blacktriangle) 跟去掉库仑 Hartree-Fock 项后的结果 (\circ) 得知。这里自旋弛豫时间是由谷间电子-声子散射决定的, 此时谷间散射在弱散射区, 自旋弛豫时间为 $\tau_{s_x} = \tau_v(k_F)$ [参见公式 (4.19)], 当初始自旋极化变大的时候谷间散射时间 $\tau_v(k_F)$ 减小, 自旋弛豫时间也相应地变小。

对于 $T = 300$ K 的情况, 自旋弛豫时间也是由谷间电子-声子散射决定的, 这跟 $T = 100$ K 中的情况一样。但是, 与 $T = 100$ K 中情况不同的是, 这里的谷间散射

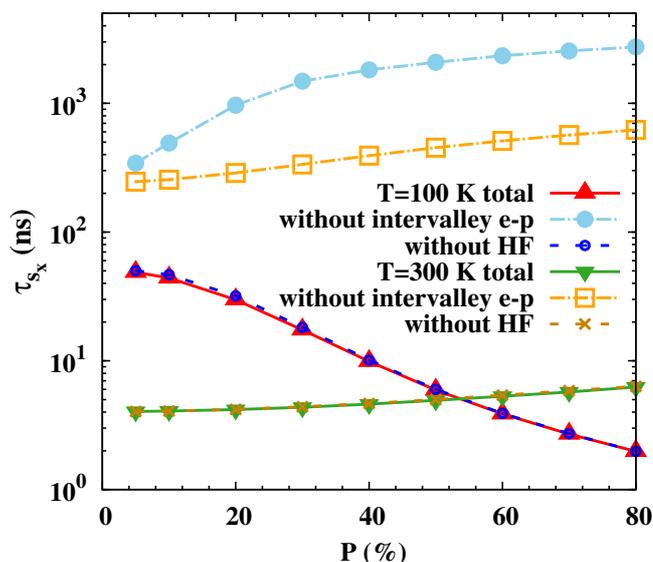


图 4-3: 自旋弛豫时间 τ_{sx} 在 $T = 100$ (300) K 时随初始自旋极化大小 P 的变化, \blacktriangle (\blacktriangledown) 表示总的自旋弛豫时间而 \bullet (\square) 中没有考虑谷间电子-声子散射, \circ (\times) 中没有考虑库仑 Hartree-Fock 自能项。电子浓度 $N_e = 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 。摘自文献 [170]。

处在强散射区, 这使得自旋弛豫时间表现出跟 $T = 100$ K 中相反的趋势。自旋弛豫时间的缓慢变化是因为在 $T = 300$ K 的时候 $\tau_v(k_F)$ 对初始自旋极化不敏感。

4.3.1.4 自旋弛豫的各向异性

这一小节我们来讨论一下自旋弛豫的各向异性。从自旋轨道耦合的形式 [参见公式 (4.4)-(4.6)] 可以看出, 平面外分量中的类 Zeeman 项占主导地位而平面内分量中的类 Zeeman 项为动量的高阶项可以忽略, 这表明平面内和平面外的自旋弛豫可能存在很强的各向异性。具体地, 我们在图 4-4 中给出了平面内 (τ_{sx}) 和平面外 (τ_{sz}) 的自旋弛豫时间随温度的变化, 在温度较低的时候两者比较接近, 当温度升高后两者有明显的差别, 在某些温度范围内 τ_{sx} 甚至可以比 τ_{sz} 小三个量级。这个现象很好理解, 当温度较高的时候谷间自旋弛豫通道可以非常显著地加快平面内的自旋弛豫, 这在前面已经很详细地讲过了, 但对于平面外的自旋弛豫而言, 谷间自旋弛豫通道几乎不起作用。

4.3.2 与实验结果的比较

在章节 1.2.3.1 中我们讲了双层石墨烯中自旋弛豫的实验研究, 不同的实验小组测量到的平面内自旋弛豫时间都在 0.01-1 ns 量级, 跟我们的理论模型在高温下的结果 (几百皮秒) 很接近。接下来我们将理论模型跟现有的实验做一个非常详细的比较。在实验中一些参数比如说门电压、温度和电子浓度是明确给出的, 但有些参数比如说平面

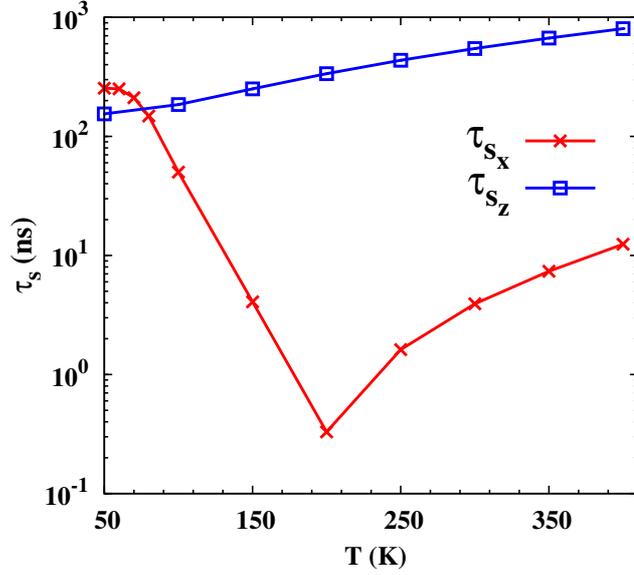


图 4-4: 自旋弛豫时间 τ_{s_x} 和 τ_{s_z} 随温度 T 的变化。电子浓度 $N_e = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 。摘自文献 [170]。

外的电场和长程杂质浓度并没有给出。在我们的计算中，平面外电场近似取为门电压跟衬底厚度的比值 [126, 154]，长程杂质浓度是通过拟合实验中给出的迁移率或者自旋扩散系数得到的。

4.3.2.1 自旋弛豫时间的温度依赖关系

我们先来比较一下自旋弛豫时间的温度依赖关系。不同实验小组测量到的自旋弛豫时间如图 4-5 所示，它们在数值上是可比拟的，但是对温度的依赖关系却很不一样，Han 和 Kawakami [147] 测到的自旋弛豫时间随温度的升高而变小，Yang 等人 [180] 和 Avsar 等人 [148] 却观测到自旋弛豫时间对温度不敏感。这里我们主要跟 Han 和 Kawakami 的实验做比较，因为他们测到的自旋弛豫时间是所有实验里最长的，意味着它们的实验中外在因素的影响相对弱一些，至于其它的实验我们会在后面有些简单的讨论。 \blacktriangle 表示 Han 和 Kawakami 实验中门电压为 $V_{\text{CNP}} + 20$ (60) V 对应电子浓度为 $N_e = 1.47$ (4.4) $\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 的情况。通过拟合实验中的自旋扩散系数，我们得到了长程杂质浓度 N_i 如图 4-5 (a) 中插图所示，这里长程杂质散射对自旋扩散系数的贡献占主导地位，其它散射可以近似不用考虑。然后我们计算了自旋弛豫时间，图 4-5 (a) 中红色实线（橙色链线）对应门电压为 $V_{\text{CNP}} + 20$ (60) V 的情况，我们发现随着温度的升高，自旋弛豫时间先减小后变大，跟章节 4.3.1.1 中给出的结果类似。此外，在高温下我们理论计算的结果跟实验测量值很接近，这表明章节 4.3.1.1 中提出的由谷间电子-声子散射和类 Zeeman 项共同导致的谷间自旋弛豫通道在高温下扮演着非常重要的角色。但是，在低温下我们的理论结果比实验值要大好几个量级，这是因为谷

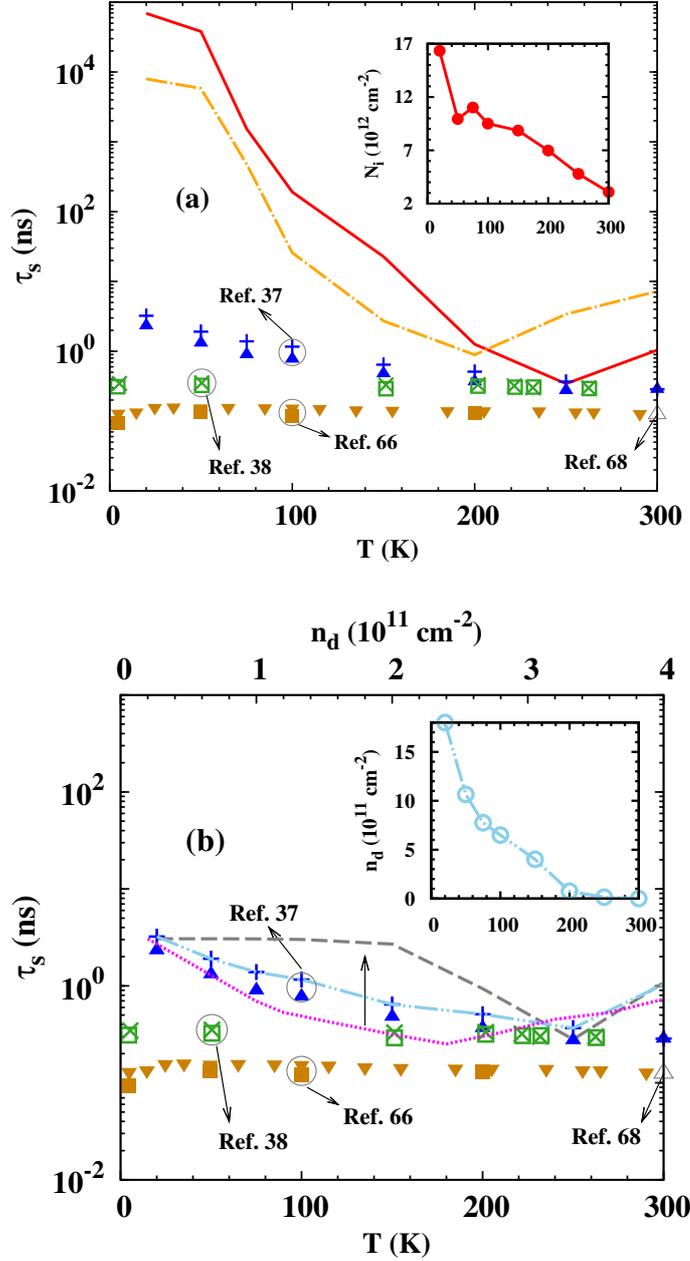


图 4-5: 平面内自旋弛豫时间 τ_s 随温度 T 的变化。+ (\blacktriangle) 表示 Han 和 Kawakami 实验 (Ref. 37) 中门电压为 $V_{\text{CNP}} + 20$ (60) V 的情况; \times (\square) 代表 Avsar 等人实验 (Ref. 38) 中电子浓度为 $N_e = 0.75$ (1.5) $\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 的情况; \blacktriangledown (\blacksquare) 对应 Yang 等人实验 (Ref. 66) 中 $N_e = 0.7$ (2.2) $\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 的情况; \triangle 表示 Neumann 等人实验 (Ref. 68) 中 $N_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 的情况。需要说明的是 Ref. 37、Ref. 38、Ref. 66 和 Ref. 68 分别对应本论文中的引文 [147]、[148]、[180] 以及 [182]。(a) 红色实线 (橙色链线) 是我们的理论计算结果对应 Han 和 Kawakami 实验 (Ref. 37) 中门电压为 $V_{\text{CNP}} + 20$ (60) V 的情况, 这里没有考虑短程杂质的影响。插图中我们给出了 $V_{\text{CNP}} + 20$ V 时长程杂质浓度 N_i 对温度的依赖关系。(b) 对应 Han 和 Kawakami 实验 (Ref. 37) 中门电压为 $V_{\text{CNP}} + 20$ V 的情况, 我们的计算中进一步考虑进短程杂质的影响, 灰色短划线和天蓝色双点链线分别表示短程杂质浓度固定为 $n_d = 2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 以及 n_d 可调节 (在插图中给出) 的情况。此外, 我们还给出了自旋弛豫时间随短程杂质浓度 (标度在图的上方) 的变化用紫色点线表示, 这里温度为 $T = 50$ K, 其它条件跟 $V_{\text{CNP}} + 20$ V 中的一样。在所有涉及短程杂质的计算中短程杂质势强度都取为 $V_0 = 6 \times 10^{-17} \text{ meV m}^2$ 。摘自文献 [170]。

间电子-声子散射在低温下被很强地压制了。由于存在这个非常明显的差异，我们必须得考虑外在因素的影响比如说表面附着原子 [134, 136, 151–155]，弯曲 [126, 156–158]，衬底 [136, 159, 160] 以及铁磁接触 [143, 149, 161, 162] 等。

4.3.2.2 短程杂质对自旋驰豫的影响

除了上面所说的几种外在因素，短程杂质也可能对自旋驰豫产生影响 [252, 255, 256]。这里，我们详细讨论一下短程杂质的贡献，短程杂质可以同时引起谷内和谷间散射 [散射项参见公式 (4.17)]，其中谷间短程杂质散射可以和类 Zeeman 项一起打开一个谷间自旋驰豫通道，这跟谷间电子-声子散射的情况是类似的，两者都属于谷间自旋驰豫机制的框架，这也是我们考虑短程杂质这一外在因素的主要原因。但是跟谷间电子-声子散射不同的是，谷间短程杂质散射对温度不敏感，可能会在低温下对平面内自旋驰豫起着很重要的作用。需要指出的是短程杂质散射对迁移率的贡献可以忽略不计，它比长程杂质散射的要小四个量级左右，此时迁移率仍然由长程杂质散射主导。我们先固定短程杂质浓度为 $n_d = 2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 计算了自旋驰豫时间的温度依赖关系如图 4-5 (b) 中灰色短划线所示，这里对应的是 Han 和 Kawakami 实验中门电压为 $V_{\text{CNP}} + 20 \text{ V}$ 的情况 [147]。通过比较我们的理论计算结果跟实验值 (+)，我们发现在低温下两者变得可比拟，这跟没有考虑谷间短程杂质散射时两者相差好几个量级形成非常鲜明的对比。进一步，我们考虑短程杂质浓度可以随温度变化，这可以通过拟合实验测量到的自旋驰豫时间得到如图 4-5 (b) 中插图所示，我们发现温度越高短程杂质浓度越小，这在物理上是合理的，但具体的细节我们这里没有考虑。拟合后得到的自旋驰豫时间是用天蓝色的双点链线表示的，它随温度变化也会有一个最小值，来源于强弱谷间散射的交叉，这在前面已经详细讨论过了。当温度低于交叉点的时候，我们的理论结果跟实验值吻合得很好，但是当温度高于交叉点的时候我们的结果始终要比实验值来得大，这个差异可能是由其它外在因素引起的。

为了更好地展现短程杂质对自旋驰豫的影响，我们计算了自旋驰豫时间随短程杂质浓度的变化如图 4-5 (b) 中紫色点线所示（短程杂质浓度的标度在图的上方），这里温度为 $T = 50 \text{ K}$ ，其它参数跟门电压为 $V_{\text{CNP}} + 20 \text{ V}$ 中的一样。我们发现随着短程杂质浓度的增加自旋驰豫时间先减小后变大，这跟上面讨论的温度依赖关系中的情况一样。这里我们研究的是低温的情况，谷间电子-声子散射几乎没有贡献，自旋驰豫时间是由谷间短程杂质散射决定的。随着短程杂质浓度的增加，谷间短程杂质散射从弱散射变到强散射，在强弱散射的交叉处自旋驰豫时间达到最小约为 252 ps，这跟由公式 (4.19) 计算得到的结果 $\tau_s \approx 232 \text{ ps}$ 非常接近。这个自旋驰豫时间的最小值可以用来简单判断实验中短程杂质是否有贡献，当实验值比最小值来得大或者两者可比拟的时候短程杂质可能有贡献，当实验值比最小值来得远小的时候可以排除短程杂质的可能性，此时只能考虑其它因素的作用。具体来说，根据实验 ▲、×、□、▼ 和 ■ 中的条件计算得到的自旋驰豫时间的最小值分别为 316、258、232、283 以及 249 ps，我们发现 Han 和 Kawakami [147] 以及 Avsar 等人 [148] 的实验值比最小值来得大，表明可以用

短程杂质来解释，但 Yang 等人 [180] 的实验值要略小于最小值，意味着短程杂质可能有贡献，但是仅用短程杂质无法解释，必须还要考虑其它外在因素的影响。

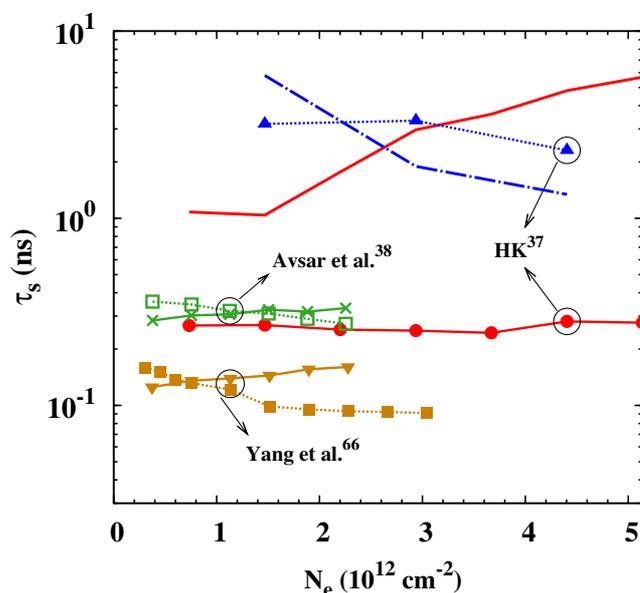


图 4-6: 平面内自旋弛豫时间 τ_s 随电子浓度 N_e 的变化。带记号的点线表示低温下的实验数据，具体为 Han 和 Kawakami (HK; Ref. 37) 在 $T = 20$ K 时以及 Avsar 等人 (Avsar et al; Ref. 38) 和 Yang 等人 (Yang et al; Ref. 66) 在 $T = 5$ K 时的测量结果。带记号的实线代表 Han 和 Kawakami, Avsar 等人 以及 Yang 等人 在室温下的实验结果。红色实线（蓝色链线）是我们的理论计算结果，对应 Han 和 Kawakami 实验中室温（低温）的情况。需要指出的是蓝色链线中考虑了短程杂质的影响，短程杂质浓度固定为 $n_d = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ，短程杂质势强度取为 $V_0 = 6 \times 10^{-17} \text{ meV m}^2$ 。摘自文献 [170]。

4.3.2.3 自旋弛豫时间的电子浓度依赖关系

我们再来比较一下自旋弛豫时间的电子浓度依赖关系。在比较之前，我们先来简单总结一下实验结果。图 4-6 中给出了不同实验小组的测量结果，带记号的点线和实线分别表示低温和室温的情况。通过比较这些实验结果我们发现 Han 和 Kawakami 在低温下测到的自旋弛豫时间最长达到几个纳秒量级 [147]，这个自旋弛豫时间比其它实验结果都要大一个量级左右。此外，不同的实验中自旋弛豫时间的浓度依赖关系也不完全一致。具体来说，在低温下，Avsar 等人 [148] 和 Yang 等人 [180] 的实验中自旋弛豫时间随电子浓度的增加而减小但 Han 和 Kawakami [147] 却观测到了一个不太明显的峰。在室温下，Avsar 等人 [148] 和 Yang 等人 [180] 测到的自旋弛豫时间随浓度的增加而变大但 Han 和 Kawakami [147] 却发现自旋弛豫时间对电子浓度不敏感。

先来看低温的情况。在章节 4.3.2.1 中已经讲过不考虑短程杂质影响的时候，我们的理论计算结果在低温下比 Han 和 Kawakami [147] 的实验值要大好几个量级，但是当考虑进短程杂质后，我们的结果变得跟实验的非常接近（参见章节 4.3.2.2）。这里，我们

严格考虑了短程杂质的贡献并跟 Han 和 Kawakami 的实验（图 4-6 中带有 ▲ 的点线）做比较，因为他们测到的自旋驰豫时间最长。在固定的短程杂质浓度 $n_d = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 和短程杂质势强度 $V_0 = 6 \times 10^{-17} \text{ meV m}^2$ 下，我们计算了自旋驰豫时间随电子浓度的变化如图 4-6 中蓝色链线所示，可以看出我们的结果跟实验值在量级上可比拟但在浓度的依赖关系却不相同。如果考虑短程杂质浓度可以随电子浓度变化，我们的结果会跟实验值比得更好一些，这里我们没有深入研究。

接下来看一下高温的情况。如图 4-6 中所示，在没有考虑短程杂质的时候我们的计算结果（红色实线）要比 Han 和 Kawakami 的实验测量值（带有 ● 的实线）要明显地大一些，具体来说，在低浓度的时候大三倍左右而在浓度较高的时候大一个量级左右。当考虑短程杂质后，我们的计算结果会变大从而更加远离实验结果（这里没有给出），原因在于在室温下谷间电子-声子散射处在强散射区，当进一步考虑短程杂质后谷间散射会变强使得自旋驰豫变慢，这在章节 4.3.1.1 中已经讲过了。这时候短程杂质已经不能很好地解释实验，必须要考虑其它外在因素的影响。

4.4 小结

在本章中，我们研究了双层石墨烯中最低导带电子的 DP 自旋驰豫。我们利用对称性分析得到了最低导带的自旋轨道耦合的解析形式，自旋轨道耦合的系数是通过拟合 Kunschuh 等人 [179] 工作中第一性原理计算的结果得到的。我们发现自旋轨道耦合对应的自旋劈裂在动量较大的时候随动量的增加而减小，这跟半导体和单层石墨烯中的情况很不一样。另外，自旋轨道耦合平面外分量的主导项是一个类 Zeeman 项，在两个谷中的有效磁场大小相等方向相反，这跟弯曲的单层石墨烯中的情况类似。这个类 Zeeman 项在谷间电子-声子散射和/或可能存在的谷间短程杂质散射的作用下可以导致谷间自旋驰豫。除了谷间电子-声子和短程杂质散射外，我们还考虑了长程电子-杂质、电子-电子库仑以及谷内电子-声子散射对自旋驰豫的影响。我们发现谷间电子-声子散射在高温下可以非常明显地加快平面内自旋驰豫，而谷间短程杂质散射对温度不敏感，可以在低温下对平面内自旋驰豫起着非常重要的作用。

具体来说，在不考虑短程杂质的时候，我们发现平面内自旋驰豫时间随温度呈现明显的非单调变化，自旋驰豫时间最小可以达到几百皮秒。这个非单调的行为来源于谷间电子-声子散射从弱散射区到强散射区的变化。此外，我们预言在低温下自旋驰豫时间的电子浓度依赖关系中会出现一个峰，这个峰跟半导体中的很不相同。我们还发现平面内自旋驰豫时间在低温下随初始自旋极化的增大而迅速减小，跟半导体和单层石墨烯中自旋驰豫时间随初始自旋极化的增大而明显变大的行为完全相反。对于平面外的自旋驰豫时间而言，在低温下它跟平面内的自旋驰豫时间可比拟，但在高温下它比平面内的大两个量级左右，此时平面内和平面外自旋驰豫表现出非常强的各向异性。这个各向异性来源于自旋轨道耦合，在它的平面外分量中类 Zeeman 项是主导项，但在平面内分量中类 Zeeman 项可以忽略不计。

我们还将理论模型跟 Han 和 Kawakami, Avsar 等人以及 Yang 等人的实验做了非常详细的比较。在不考虑谷间散射的时候，我们的理论计算结果始终比实验测量值大好几个量级。考虑进谷间电子-声子散射后，我们的计算结果在高温下跟实验值可比拟，这表明谷间电子-声子散射在高温下对平面内自旋弛豫起着非常重要的作用，但在低温下仍然比实验值大几个量级。进一步考虑进对温度不敏感的谷间短程杂质散射后，我们的结果在低温下也可以跟实验结果很接近。我们还给出了一个判断短程杂质是否有贡献的简单依据，即用平面内自旋弛豫时间在短程杂质浓度依赖关系中出现的最小值（最小值也是来源于强弱散射的交叉）跟实验值做比较，当实验值较大或者两者可比拟的时候短程杂质可能有贡献，当实验值远小的时候短程杂质的可能性可以不用考虑，此时需要考虑其它外在因素的影响。

第五章 单层 MoS₂ 中的电子自旋弛豫

在章节 1.2.4 中我们已经介绍了单层 MoS₂ 中自旋弛豫的研究现状。这一章主要讲一下我们自己在这方面的理论研究工作 [105, 171]。我们先研究了单层 MoS₂ 中 DP 机制下的谷间自旋弛豫过程 [171]，谷间自旋弛豫是由在两个能谷中大小相等方向相反的有效磁场和谷间电子-声子散射共同导致的。我们发现平面内自旋弛豫时间随温度的升高而单调变小，这是因为谷间电子-声子散射在我们研究的参数范围内始终处于弱散射区。此外，我们还讨论了自旋弛豫对电子浓度和初始自旋极化的依赖。这里我们考虑的本征自旋轨道耦合是动量无关的，因而谷内 DP 自旋弛豫过程是被禁戒的，实际上由 Rostami 等人 [212]最近的工作可知本征自旋轨道耦合是可以有动量依赖的。紧接着，我们从更完整的（动量依赖的）本征自旋轨道耦合出发研究了单层 MoS₂ 中 DP 机制下的谷内自旋弛豫过程 [105]并与谷间自旋弛豫过程做了详细的比较。此外，在谷内过程中电子-电子库仑散射始终占据主导地位而电子-杂质散射的贡献可以忽略，这跟半导体 [7]和石墨烯 [104, 170]中的情况很不一样。接下来我们详细介绍一下这两个工作。

5.1 单层 MoS₂ 中的谷间自旋弛豫过程

5.1.1 哈密顿量和动力学自旋 Bloch 方程

在有效质量近似下，单层 MoS₂ 在 K (K') 附近最低导带的哈密顿量可以写成 [214]

$$H_{\text{eff}}^{\mu} = \mathbf{k}^2/(2m^*) + \mathbf{\Omega}^{\mu} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2, \quad (5.1)$$

$$\mathbf{\Omega}^{\mu} = 2\omega\mu\hat{z}, \quad (5.2)$$

这里 m^* 是电子的有效质量， $\mathbf{\Omega}^{\mu}$ 表示自旋轨道耦合提供的有效磁场，其中 ω 是自旋轨道耦合强度， $\mu = 1$ (-1) 代表 K (K') 谷， z 轴为平面外（垂直于单层 MoS₂ 平面）方向。这里的自旋轨道耦合是动量无关的因而 DP 机制下的谷内自旋弛豫不能发生。

接下来我们构造动力学自旋 Bloch 方程来研究单层 MoS₂ 中的谷间 DP 自旋弛豫 [7]。方程（包括相干进动项和散射项）的具体形式在章节 2.1 中已经给过了，其中散射项只包含了谷间电子-声子散射包括电子-KTA 声子、电子-KLA 声子、电子-KTO 声子以及电子-KLO 声子散射，KTA、KLA、KTO 和 KLO 分别表示横向声学、纵向声学、横向光学和纵向光学声子模在 K 点处的延拓 [199, 210]，其它跟谷间自旋弛豫无关的散射比如电子-杂质、电子-电子库仑以及谷内电子-声子散射都没有考虑。具体地，我

们给出了在平面内自旋弛豫中占主导地位的电子-KTA 声子 ($|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KTA}}|^2$) 和电子-KLO 声子 ($|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KLO}}|^2$) 散射的矩阵元 [199]

$$|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KTA}}|^2 = \frac{(D_{\text{K,TA}}^1)^2 q^2}{2A\rho\Omega_{\text{K,TA}}} \delta_{\mu',-\mu}, \quad (5.3)$$

$$|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^{\text{KLO}}|^2 = \frac{(D_{\text{K,LO}}^0)^2}{2A\rho\Omega_{\text{K,LO}}} \delta_{\mu',-\mu}, \quad (5.4)$$

$q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$, A 是样品的面积; $\rho = 3.1 \times 10^{-7} \text{ g/cm}^2$ 是单层 MoS₂ 的质量密度; $\Omega_{\text{K,TA}} = 23 \text{ meV}$ 和 $\Omega_{\text{K,LO}} = 42 \text{ meV}$ 分别表示 KTA 和 KLO 声子能量; $D_{\text{K,TA}}^1 = 5.9 \text{ eV}$ ($D_{\text{K,LO}}^0 = 2.6 \times 10^8 \text{ eV/cm}$) 是电子-KTA (-KLO) 声子散射的形变势。其它谷间电子-声子散射矩阵元的形式可以参见 Kaasbjerg 等人 [199, 208] 的工作。需要指出的是在 Kaasbjerg 等人的工作中考虑了载流子屏蔽对电子-声子散射的影响 [246], 但对于谷间电子-声子散射来说两个谷之间的动量差太大使得屏蔽基本可以忽略。

在文献中, 电子有效质量和自旋轨道耦合强度的大小存在一些争议 [120, 183, 199, 200, 207, 210, 213, 214], 这里我们选取有效质量 $m^* = 0.48m_0$ [199, 214], m_0 是自由电子质量, 自旋轨道耦合强度 $\omega = 1.5 \text{ meV}$ [183, 206, 214]。需要说明的是有效质量和自旋轨道耦合强度的改变不会对自旋弛豫的定性行为产生影响。有了这些参数后, 我们通过严格数值求解动力学自旋 Bloch 方程可以得到单层 MoS₂ 中的谷间 DP 自旋弛豫时间 [7]。这里初始自旋极化方向选在平面内, 初始自旋极化大小为 2.5%, 其它情况会特别指出。平面内自旋极化很难直接用光学方法得到, 因为能带结构和光学选择定则决定了光激发只能实现平面外的自旋极化 [118, 119, 121, 122, 191, 194, 197]。但是, 施加一个平面内的磁场后, 平面外的自旋极化就会产生进动从而实现平面内的分量 [232]。此外, 平面内自旋极化还可以通过电学方法得到 [138, 257], 这比光学方法要简单直接。

5.1.2 自旋弛豫对温度的依赖

我们先来研究一下自旋弛豫的温度依赖关系。我们计算了平面内自旋弛豫时间 τ_s (\times) 随温度的变化如图 5-1 (a) 所示, 可以看出自旋弛豫时间随温度的升高而单调变小。这里, 自旋弛豫时间是由自旋轨道耦合和谷间电子-声子散射导致的谷间自旋弛豫通道决定的 [158, 170]。在弹性散射近似下, 平面内自旋弛豫时间为

$$\tau_s = \begin{cases} \tau_v & \text{弱散射区 } (2\omega\tau_v \geq 1) \\ \frac{1}{2\omega^2\tau_v} & \text{强散射区 } (2\omega\tau_v \ll 1), \end{cases} \quad (5.5)$$

其中 τ_v 表示谷间电子-声子散射时间。这里谷间电子-声子散射始终处在弱散射区, 因而自旋弛豫时间 $\tau_s = \tau_v$, 它随温度的升高而逐渐变小, 跟弯曲的单层石墨烯 [158] 和平整的双层石墨烯 [170] 中谷间自旋弛豫时间随温度变化呈现出非单调行为很不一样。物理原因很简单, 单层 MoS₂ 中自旋轨道耦合强度在 meV 量级远比石墨烯中的 (μeV 量

级) 来得大, 因而在我们研究的参数范围内单层 MoS₂ 很难进入强散射区。

此外, 我们还比较了不同的谷间电子-声子散射对自旋弛豫的贡献, 其中谷间电子-KTA 声子和谷间电子-KLO 声子散射占据主导地位。我们分别计算了这两个谷间电子-声子散射导致的谷间自旋弛豫时间如图 5-1 (a) 所示, ■ (●) 对应谷间电子-KTA (-KLO) 声子散射。我们发现电子-KTA 声子散射在低温下扮演着更重要的角色而电子-KLO 声子散射在高温下成为主导, 这可以从电子-声子散射矩阵元和声子数目两个因素来理解。电子-KTA 声子散射矩阵元比电子-KLO 声子散射矩阵元来得小但是 KTA 声子数目更大因为声子能量更小 [199, 210]。在低温下, KTA 声子数目比 KLO 的来得远大, 这使得电子-KTA 声子散射更强从而对自旋弛豫贡献更大。但在高温下, 两个声子数目变得可比拟, 电子-KLO 声子散射具有更大的散射矩阵元因而在自旋弛豫中扮演着更重要的角色。

5.1.3 自旋弛豫对电子浓度的依赖

我们再来看一下平面内自旋弛豫时间对电子浓度的依赖关系。我们计算了当温度 $T = 100$ (300) K 时平面内自旋弛豫时间随电子浓度的变化如图 5-1 (b) 中 × (●) 所示, 可以看到在 $T = 100$ K 的时候自旋弛豫时间随电子浓度的增加而迅速减小但在 $T = 300$ K 的时候随着电子浓度的增加自旋弛豫时间非常缓慢地变小。我们先来分析一下 $T = 100$ K 的情况。在自旋弛豫的温度依赖关系中我们讲过谷间电子-KTA 和 -KLO 声子散射在自旋弛豫的过程中占主导地位, 电子-KLO 声子散射对电子浓度不敏感因为它的矩阵元 [参见公式 (5.4)] 是动量无关的, 但是电子-KTA 声子散射随着电子浓度的增加会被加强原因在于散射矩阵元 [参见公式 (5.3)] 随动量的变大而增大。因此, 当电子浓度增加的时候, 电子-KTA 声子散射会增强使得自旋弛豫时间变小 ($\tau_s = \tau_v$)。对于 $T = 300$ K 的情况, 随着电子浓度的增加, 电子-KTA 声子散射矩阵元的增强没有 $T = 100$ K 时那么敏感。另外, 当温度从 $T = 100$ K 升高到 $T = 300$ K 后, 电子-KLO 声子散射对自旋弛豫的作用变得更重要, 这可以从自旋弛豫的温度依赖关系中看出。上面这两个因素都使自旋弛豫时间表现出缓慢变小的行为。

5.1.4 初始自旋极化对自旋弛豫的影响

在之前关于半导体 [93, 95, 219] 和单层石墨烯 [104] 的研究中, 自旋弛豫时间随着初始自旋极化的变大而明显变大, 这来源于库仑 Hartree-Fock 项的贡献。但是, 在双层石墨烯中, 随着初始自旋极化的变大, 自旋弛豫时间在低温下迅速减小但在高温下缓慢变大 [170], 这是因为自旋弛豫时间是由谷间电子-声子散射决定的而库仑 Hartree-Fock 项的贡献可以忽略。这里 (在单层 MoS₂ 中), 我们也研究了自旋弛豫对初始自旋极化的依赖。我们计算了在 $T = 100$ (300) K 的时候平面内自旋弛豫时间随初始自旋极化的变化如图 5-1 (c) 中 ▲ (▼) 所示。自旋弛豫时间在 $T = 100$ K 的时候随初始自旋极化的变大而减小但在 $T = 300$ K 的时候对初始自旋极化不敏感。我们先来看一下 $T = 100$ K 的

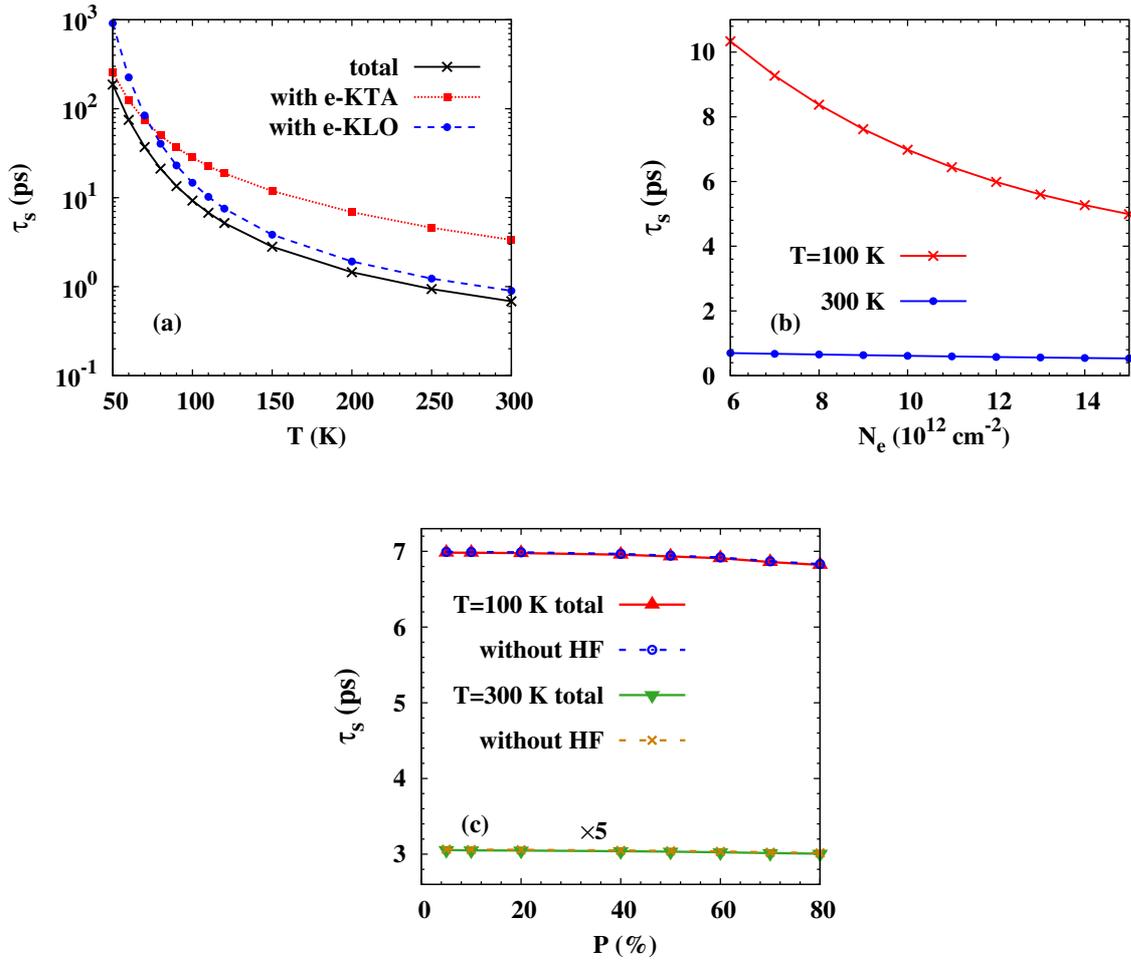


图 5-1: (a) 总的平面内自旋弛豫时间 τ_s (\times) 随温度 T 的变化。 \blacksquare (\bullet) 表示只考虑了谷间电子-KTA (-KLO) 声子散射对自旋弛豫的影响。电子浓度 $N_e = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; (b) τ_s 在 $T = 100$ (300) K 时随 N_e 的变化; (c) 自旋弛豫时间 τ_s 在 $T = 100$ (300) K 时随初始自旋极化大小 P 的变化, \blacktriangle (\blacktriangledown) 表示总的自旋弛豫时间而 \circ (\times) 中没有考虑库仑 Hartree-Fock 自能项。电子浓度 $N_e = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 。摘自文献 [171]。

情况，它跟半导体和单层石墨烯中的情况很不一样但是跟双层石墨烯在低温下的情况类似。为了理解自旋弛豫的行为，我们计算了去掉库仑 Hartree-Fock 项后的自旋弛豫时间如图中 ● 所示，发现跟总的自旋弛豫时间几乎完全重合，表明库仑 Hartree-Fock 项的贡献可以忽略，这里自旋弛豫时间是由谷间电子-声子散射决定的。前面讲过谷间电子-声子散射处在弱散射区，自旋弛豫时间近似为 $\tau_s = \tau_v$ ，它随初始自旋极化的变大而减小。对于 $T = 300$ K 的情况，自旋弛豫时间也是由 $\tau_s = \tau_v$ 决定的，但 τ_v 在 $T = 300$ K 的时候对初始自旋极化不敏感。

5.2 单层 MoS₂ 中的谷内及谷间自旋弛豫过程

在上一章节中，我们讨论了单层 MoS₂ 中 DP 机制下的谷间自旋弛豫过程，其中自旋轨道耦合 [参见公式 (5.2)] 是动量无关的，它会使谷内 DP 自旋弛豫过程被严格禁戒。实际上，我们从更完整的哈密顿量出发可以得到动量依赖的自旋轨道耦合，此时谷内 DP 自旋弛豫通道会被打开。接下来我们将详细讨论一下单层 MoS₂ 中由谷内和谷间自旋弛豫过程导致的总的自旋弛豫的行为以及谷内谷间过程的相对重要性 [105]。出于完整性的考虑，我们还研究了 EY 机制下的自旋弛豫。

5.2.1 哈密顿量以及动力学自旋 Bloch 方程

在单层 MoS₂ 中，用来描述 K (K') 点附近最低导带价带的完整的两带哈密顿量为 [197, 212, 214]

$$H_{\mu}^{\text{tot}} = \Delta\tau_z/2 + \lambda_v\mu\sigma_z(1 - \tau_z)/2 + t_0a_0\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\mu} + \frac{k^2}{4m_0}(\alpha + \beta\tau_z) + t_1a_0^2\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\mu}^*\tau_x\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\mu}^* + \lambda_c\mu\sigma_z(1 + \tau_z)/2, \quad (5.6)$$

其中 $\boldsymbol{\tau}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 分别表示两个 Bloch 基矢空间和自旋空间的泡利矩阵； $\boldsymbol{\tau}_{\mu} = (\mu\tau_x, \tau_y)$ ； Δ 是能隙的大小； λ_v 和 λ_c 分别表示价带和导带的自旋轨道耦合强度。这个总的哈密顿量可以分成动量无关和动量依赖的两部分，其中动量无关的部分是主导项。我们将动量无关的部分定义为 $H_0 = \Delta\tau_z/2 + \lambda_v\mu\sigma_z(1 - \tau_z)/2 + \lambda_c\mu\sigma_z(1 + \tau_z)/2$ 。考虑到能隙 Δ 很大，我们可以利用 Löwdin 块对角化的方法得到导带的有效哈密顿量 [86, 242]，Löwdin 块对角化的方法是将比较复杂的多带哈密顿量近似地约化到我们需要的子空间中去从而得到子空间的有效哈密顿量，这种方法最大的好处是可以得到完全解析的有效哈密顿量形式。保留到动量的三次方项，导带的有效哈密顿量可以写成

$$H_{\text{eff}}^{\mu} = \mathbf{k}^2/(2m^*) + (\boldsymbol{\Omega}^{\mu} + g\mu_B\mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\sigma}/2, \quad (5.7)$$

$$\boldsymbol{\Omega}^{\mu} = [2\lambda_c\mu + \mu A_1k^2 + A_2(k_x^3 - 3k_xk_y^2)]\hat{\mathbf{z}}. \quad (5.8)$$

这里， $g\mu_B\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}/2$ 是平面内磁场 \mathbf{B} 引起的塞曼项，其中 g 是 Landé 因子，这里我们没有考虑磁场的轨道效应，需要指出的是这一项是我们外加的不是通过 Löwdin 块对角化得到的。另外，有效质量 m^* 和自旋轨道耦合系数 $A_{1,2}$ 的具体形式如下

$$m^{*-1} = 2a_0^2t_0^2/\Delta + (\alpha + \beta)/(2m_0), \quad (5.9)$$

$$A_1 = 2a_0^2t_0^2(\lambda_v - \lambda_c)/\Delta^2, \quad (5.10)$$

$$A_2 = 4t_0t_1a_0^3(\lambda_v - \lambda_c)/\Delta^2. \quad (5.11)$$

自旋轨道耦合的形式 [参见公式 (5.8)] 还可以通过对称性分析得到，具体细节参见附录 C.1。下面我们来仔细分析一下自旋轨道耦合的性质，前两项包含谷指标，扮演着类 Zeeman 项的角色，它可以跟谷间散射一起导致谷间 DP 自旋驰豫。后面两项在公式 (5.2) 中是不存在的，它们是动量依赖的，可以跟谷内散射一起导致谷内 DP 自旋驰豫，还可以跟谷间散射一起导致谷间 DP 自旋驰豫，需要指出的是这里的谷间自旋驰豫过程跟由类 Zeeman 项引起的相比可以忽略，因此接下来我们提到的谷间自旋驰豫过程都是指由类 Zeeman 项导致的。另外需要强调的是只有自旋轨道耦合的最后一项是各向异性的，它可以跟电子-杂质散射一起导致 DP 自旋驰豫，这是我们在做 Löwdin 块对角化时保留到动量的三次方项的原因。

接下来我们利用动力学自旋 Bloch 方程来研究单层 MoS₂ 中的电子自旋驰豫 [7]。这里主要讲一下方程中的散射项，它包括电子-电子库仑、电子-杂质、谷内电子-声子以及谷间电子-声子散射，这些散射中既有自旋守恒部分也有自旋翻转部分。我们给出在谷内（谷间）自旋驰豫过程中占主导地位的电子-电子库仑（谷间电子-声子）散射的具体形式。电子-电子库仑散射为

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{\mu\mathbf{k}}|_{ee} = & -\pi \sum_{\mu'\mathbf{k}'\mathbf{k}''} |V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^\mu|^2 \delta(\epsilon_{\mu\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mu\mathbf{k}} + \epsilon_{\mu'\mathbf{k}''} - \epsilon_{\mu'\mathbf{k}''-\mathbf{k}+\mathbf{k}'}) \left[\text{Tr}(\hat{\Lambda}_{\mu'\mathbf{k}'',\mu'\mathbf{k}''-\mathbf{k}+\mathbf{k}'} \right. \\ & \times \rho_{\mu'\mathbf{k}''-\mathbf{k}+\mathbf{k}'}^< \hat{\Lambda}_{\mu'\mathbf{k}''-\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mu'\mathbf{k}''} \rho_{\mu'\mathbf{k}''}^> \hat{\Lambda}_{\mu\mathbf{k},\mu\mathbf{k}'} \rho_{\mu\mathbf{k}'}^> \hat{\Lambda}_{\mu\mathbf{k}',\mu\mathbf{k}} \rho_{\mu\mathbf{k}}^< - \text{Tr}(\hat{\Lambda}_{\mu'\mathbf{k}'',\mu'\mathbf{k}''-\mathbf{k}+\mathbf{k}'} \\ & \times \rho_{\mu'\mathbf{k}''-\mathbf{k}+\mathbf{k}'}^> \hat{\Lambda}_{\mu'\mathbf{k}''-\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mu'\mathbf{k}''} \rho_{\mu'\mathbf{k}''}^< \hat{\Lambda}_{\mu\mathbf{k},\mu\mathbf{k}'} \rho_{\mu\mathbf{k}'}^< \hat{\Lambda}_{\mu\mathbf{k}',\mu\mathbf{k}} \rho_{\mu\mathbf{k}}^> \left. \right] + \text{H.c.}, \quad (5.12) \end{aligned}$$

这里 $\epsilon_{\mu\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/(2m^*)$ ， $|V_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\mu|^2 = [V_{\mathbf{q}}^{(0)}/\varepsilon(\mathbf{q})]^2$ 是电子-电子库仑散射矩阵元，其中

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = 1 - V_{\mathbf{q}}^{(0)} \sum_{\mu\mathbf{k}\mathbf{s}} \frac{f_{\mathbf{k}\mathbf{s}}^\mu - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mathbf{s}}^\mu}{\epsilon_{\mu\mathbf{k}} - \epsilon_{\mu\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \quad (5.13)$$

表示随机相位近似下的屏蔽 [246]， $V_{\mathbf{q}}^{(0)} = 2\pi e^2/(\kappa q)$ 代表裸的二维库仑势。

谷间电子-声子散射可以写成

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{\mu\mathbf{k}}|_{\text{ep}} = & -\pi \sum_{\mu'\mathbf{k}'\eta,\pm} |M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^\eta|^2 \delta(\epsilon_{\mu'\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mu\mathbf{k}} \pm \omega^\eta) (N_\eta^\pm \hat{\Lambda}_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'} \rho_{\mu'\mathbf{k}'}^\gt \hat{\Lambda}_{\mu'\mathbf{k}',\mu\mathbf{k}} \rho_{\mu\mathbf{k}}^\lt \\ & - N_\eta^\mp \hat{\Lambda}_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'} \rho_{\mu'\mathbf{k}'}^\lt \hat{\Lambda}_{\mu'\mathbf{k}',\mu\mathbf{k}} \rho_{\mu\mathbf{k}}^\gt) + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (5.14)$$

其中, $|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}^\eta|^2$ 是谷间电子-声子散射矩阵元, 具体形式参见公式 (5.3) 和 (5.4); ω^η 表示声子能量; $N_\eta^\pm = N_\eta + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}$, N_η 代表声子数目; $\eta = \text{KTA, KLO}$ 。

在上面的两个散射项中 $\hat{\Lambda}_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}$ 表示导带价带的自旋混合, 它可以导致自旋翻转散射从而引起 EY 自旋弛豫。具体形式为 [7]

$$\hat{\Lambda}_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'} = \hat{I} - [S_{\mu\mathbf{k}}^{(1)} S_{\mu\mathbf{k}}^{(1)\dagger} - 2S_{\mu\mathbf{k}}^{(1)} S_{\mu'\mathbf{k}'}^{(1)\dagger} + S_{\mu'\mathbf{k}'}^{(1)} S_{\mu\mathbf{k}}^{(1)\dagger}] / 2, \quad (5.15)$$

$$\begin{aligned} S_{\mu\mathbf{k}}^{(1)} = & -\{a_0 t_0 (\mu k_x - i k_y) + t_1 a_0^2 [(k_x^2 - k_y^2) + 2i \mu k_x k_y]\} \\ & \times [\hat{I} / \Delta + \mu \sigma_z (\lambda_v - \lambda_c) / \Delta^2]. \end{aligned} \quad (5.16)$$

这里, \hat{I} 表示一个 2×2 的单位矩阵。在不考虑自旋混合的时候 $\hat{\Lambda}_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'} = \hat{I}$, 此时散射项均为自旋守恒散射。当考虑进自旋混合后, 拿第二项 $S_{\mu\mathbf{k}}^{(1)} S_{\mu\mathbf{k}}^{(1)\dagger}$ 来说, 它正比于 $[\frac{\hat{I}}{\Delta} + \frac{\mu \sigma_z (\lambda_v - \lambda_c)}{\Delta^2}]^2 = [\frac{1}{\Delta^2} + \frac{(\lambda_v - \lambda_c)^2}{\Delta^4}] \hat{I} + \frac{2(\lambda_v - \lambda_c) \mu}{\Delta^3} \sigma_z$, 包含 σ_z 的项会引起平面内自旋的翻转, 此时散射项中既有自旋守恒部分又能提供自旋翻转。这里的自旋翻转散射项 ($\propto \Delta^{-3}$) 的贡献比较小因为体系的能隙很大导致导带价带的自旋混合很小。最后两项也可以做类似的分析, 这意味着 EY 自旋弛豫时间可能非常长。

通过严格数值求解动力学自旋 Bloch 方程可以得到体系的自旋弛豫时间。初始自旋极化大小选为 2.5 %, 平面内磁场为零, 其它情况会特别说明。计算中用到的参数如表 5-1 所示。利用公式 (5.9) 我们可以计算得到有效质量 $m^* = 0.38m_0$, 从公式 (5.10) 和 (5.11) 出发可以分别得到自旋轨道耦合系数 $A_1 = 417.94 \text{ meV \AA}^2$ 和 $A_2 = 92.52 \text{ meV \AA}^3$ 。

表 5-1: 计算中用到的参数。

Δ	1.9 eV	λ_c	1.5 meV ^a
λ_v	80 meV	t_0	1.68 eV
t_1	0.1 eV	α	0.43
β	2.21	a_0	1.85 \AA
g	2 ^b	κ	3.43 ^c

^a 取自文献 [183], ^b 取自文献 [258], ^c 取自文献 [200], 其余参数取自文献 [212]。

5.2.2 平面内自旋驰豫

我们先来看一下平面内自旋驰豫的温度依赖关系。图 5-2 中给出了不同电子浓度下平面内自旋驰豫时间随温度的变化，其中杂质浓度选取为 $N_i = 0.1N_e$ ， N_e 是电子浓度。我们先来分析一下电子浓度 $N_e = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 的情况如图 5-2 (a) 所示，通过比较 EY (+) 和 DP (×) 机制下的自旋驰豫时间可以看出由 EY 机制导致的自旋驰豫时间要比 DP 的大四个量级左右，当我们人为地将杂质浓度提高两个量级到 $N_i = 10N_e$ 的时候 EY 自旋驰豫时间仍然比 DP 的大两个量级（没有在图中给出），这表明 EY 机制对平面内自旋驰豫的贡献可以忽略，原因在于导带价带间自旋混合非常小。接下来我们只关注占主导地位的 DP 自旋驰豫，我们发现 DP 自旋驰豫时间随温度的升高而单调变小。为了理解这个行为，我们计算了只有谷内 (■) 或者谷间 (●) 过程时的自旋驰豫时间，可以看出谷内和谷间自旋驰豫时间都随温度的升高而减小，导致总的自旋驰豫时间也变小。通过比较这两个过程我们发现在低温下谷内自旋驰豫过程更重要但是在高温下谷间自旋驰豫过程扮演着更重要的角色。此外，跟谷间自旋驰豫时间的迅速减小不同 [171]，我们发现谷内自旋驰豫时间随温度的升高而缓慢变小，当我们把电子浓度增大到 $N_e = 1.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ [如图 5-2 (b) 所示] 和 $N_e = 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ [如图 5-2 (c) 所示] 的时候也能看到类似的行为。

为了理解谷内自旋驰豫时间随温度的升高而缓慢变小的行为，我们计算了只有电子-电子库仑散射、电子-杂质散射或者谷内电子-声子散射时的谷内自旋驰豫时间，发现电子-杂质散射导致的自旋驰豫时间 (▼) 比总的谷内自旋驰豫时间 (■) 要大三个量级左右，表明电子-杂质散射对谷内自旋驰豫的贡献几乎可以忽略，跟半导体 [7] 和单双层石墨烯 [104, 170] 中电子-杂质散射在自旋驰豫中起着非常重要的作用完全不同。这里，在电子-杂质散射的过程中电子只能感受到自旋轨道耦合中各向异性的项 [公式 (5.8) 中最后一项] 提供的非均匀扩展，该各向异性项是动量的高阶项导致非均匀扩展非常弱，使得电子-杂质散射对谷内自旋驰豫贡献很小。如果进一步忽略自旋轨道耦合的立方项（各向异性的项），由电子-杂质散射导致的 DP 自旋驰豫时间会变成无穷长。在谷内自旋驰豫过程中占据主导地位的是电子-电子库仑散射，这可以从图 5-2 (a) 中总的谷内自旋驰豫时间 (■) 跟电子-电子库仑散射导致的自旋驰豫时间 (▲) 几乎重合可以看出。

由电子-电子库仑散射导致的谷内自旋驰豫时间在简并区（电子浓度 $N_e = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ， $1.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 和 $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 对应的费米温度分别为 $T_F \sim 256 \text{ K}$ ， 548 K 以及 731 K ）随温度升高而减小的行为跟半导体中的情况很不一样 [96, 99, 100, 103, 106, 109, 111, 259]，在半导体中当电子-电子库仑散射占据主导地位的时候，理论上预言自旋驰豫时间的温度依赖关系中会出现一个峰 [96, 102]，实验上很快证实了这个预言 [106, 109, 259]，峰出现的物理原因为电子-电子库仑散射在简并（非简并）区随温度升高而变强（弱）。需要指出的是在单层 MoS₂ 中电子-电子库仑散射的行为跟半导体中的类似，那两者自旋驰豫行为的不同只可能来源于非均匀扩展的差异，为了搞清楚背后的物理，接下来我们利用解析的方法来研究一下电子-电子库仑散射导致的谷内自旋

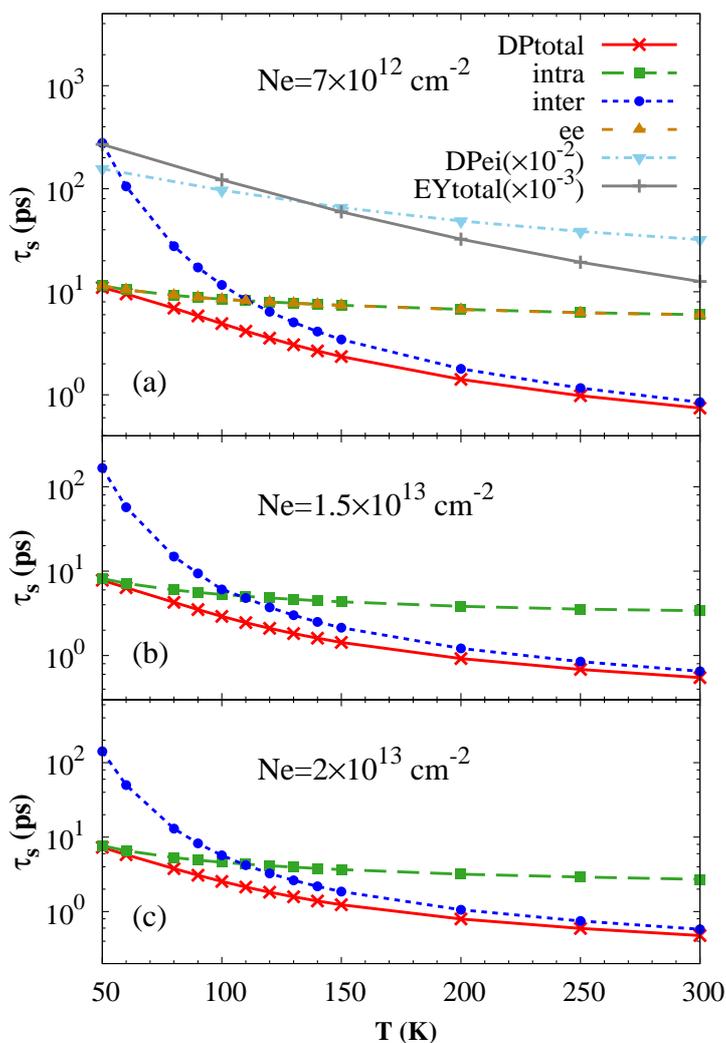


图 5-2: DP 机制下平面内自旋弛豫时间 τ_s (\times) 随温度 T 的变化, \blacksquare (\bullet) 表示只有谷内 (谷间) 自旋弛豫过程。(a) 电子浓度 $N_e = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; (b) $N_e = 1.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$; (c) $N_e = 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 。此外, 在 (a) 中, \blacktriangle (\blacktriangledown) 表示只考虑电子-电子库仑散射 (电子-杂质散射) 对 DP 自旋弛豫时间的贡献, $+$ 代表 EY 自旋弛豫时间。杂质浓度 $N_i = 0.1N_e$ 。摘自文献 [105]。

驰豫。

只考虑电子-电子库仑散射的时候，动力学自旋 Bloch 方程在驰豫时间近似下可以写成以下形式

$$\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \frac{i}{2}[(2\lambda_c + A_1 k^2)\sigma_z, \rho_{\mathbf{k}}] = - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\rho_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}'}}{\tau_{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}^{ee}}, \quad (5.17)$$

其中 $\tau_{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}^{ee}$ 表示由电子-电子库仑散射导致的动量散射时间。需要指出的是自旋轨道耦合中的谷指标被忽略了，因为这里只考虑谷内自旋驰豫过程，另外自旋轨道耦合中的各向异性项因为贡献太小也没有考虑。这个方程很难严格解析求解，但根据自旋轨道耦合只跟动量大小有关这一特性，我们可以借助一个简单可解的两态模型来分析。具体来说，

$$\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \frac{i}{2}[(2\lambda_c + A_1 k^2)\sigma_z, \rho_{\mathbf{k}}] = - \frac{\rho_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}'}}{\tau^{ee}}, \quad (5.18)$$

$$\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}'}}{\partial t} + \frac{i}{2}[(2\lambda_c + A_1 k'^2)\sigma_z, \rho_{\mathbf{k}'}] = - \frac{\rho_{\mathbf{k}'} - \rho_{\mathbf{k}}}{\tau^{ee}}, \quad (5.19)$$

这里我们采用了各向同性近似，这个近似在自旋轨道耦合是各向同性的情况下是合理的。我们令 $B_1 = 2\lambda_c + A_1(k^2 + k'^2)/2$ 以及 $B_2 = A_1(k^2 - k'^2)/2$ 可得

$$\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \frac{i}{2}[(B_1 + B_2)\sigma_z, \rho_{\mathbf{k}}] = - \frac{\rho_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}'}}{\tau^{ee}}, \quad (5.20)$$

$$\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}'}}{\partial t} + \frac{i}{2}[(B_1 - B_2)\sigma_z, \rho_{\mathbf{k}'}] = - \frac{\rho_{\mathbf{k}'} - \rho_{\mathbf{k}}}{\tau^{ee}}. \quad (5.21)$$

在么正变换 $\rho_{\mathbf{k}} = e^{-iB_1\sigma_z t/2} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}} e^{iB_1\sigma_z t/2}$ 的作用下，上面的方程变成

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \frac{i}{2}B_2[\sigma_z, \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}] = - \frac{\tilde{\rho}_{\mathbf{k}} - \tilde{\rho}_{\mathbf{k}'}}{\tau^{ee}}, \quad (5.22)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_{\mathbf{k}'}}{\partial t} - \frac{i}{2}B_2[\sigma_z, \tilde{\rho}_{\mathbf{k}'}] = - \frac{\tilde{\rho}_{\mathbf{k}'} - \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}}{\tau^{ee}}. \quad (5.23)$$

我们定义自旋矢量 $\tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}}(t) = \text{Tr}(\tilde{\rho}_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\sigma})$ ，通过简单计算可得

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}}}{\partial t} + B_2(\tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{z}}) = - \frac{\tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}'}}{\tau^{ee}}, \quad (5.24)$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}'}}{\partial t} - B_2(\tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}'} \times \hat{\mathbf{z}}) = - \frac{\tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}'} - \tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}}}{\tau^{ee}}. \quad (5.25)$$

我们不失一般性地选取初始自旋极化沿着 x 方向，初始条件为 $\tilde{S}_{\mathbf{k}}^x(0) = P_{\mathbf{k}0}$ ， $\tilde{S}_{\mathbf{k}'}^x(0) =$

$P_{k'0}$ 以及 $\tilde{S}_k^y(0) = \tilde{S}_{k'}^y(0) = 0$, 在 $|B_2|\tau^{\text{ee}} \ll 1$ 近似下上面两个方程的解具有以下形式

$$\tilde{S}_k^x + \tilde{S}_{k'}^x = (P_{k0} + P_{k'0})e^{-B_2^2\tau^{\text{ee}}t/2}, \quad (5.26)$$

$$\tilde{S}_k^y + \tilde{S}_{k'}^y = (P_{k0} - P_{k'0})(e^{-B_2^2\tau^{\text{ee}}t/2} - e^{-2t/\tau^{\text{ee}}})B_2\tau^{\text{ee}}/2. \quad (5.27)$$

于是, 沿着 x 方向总的自旋矢量可以写成

$$\begin{aligned} S_k^x + S_{k'}^x &= \text{Tr}[(\rho_k + \rho_{k'})\sigma_x] \\ &= \text{Tr}[e^{-iB_1\sigma_z t/2}(\tilde{\rho}_k + \tilde{\rho}_{k'})e^{iB_1\sigma_z t/2}\sigma_x] \\ &= \cos(B_1 t)(\tilde{S}_k^x + \tilde{S}_{k'}^x) - \sin(B_1 t)(\tilde{S}_k^y + \tilde{S}_{k'}^y) \\ &\approx (P_{k0} + P_{k'0})\cos(B_1 t)e^{-tB_2^2\tau^{\text{ee}}/2}. \end{aligned} \quad (5.28)$$

在简并极限下, 上面总的自旋矢量可以近似为

$$S_{k_F}^x \approx P_{k_F0} \cos[(2\lambda_c + A_1 k_F^2)t]e^{-t/\tau_s(k_F)}, \quad (5.29)$$

其中自旋弛豫时间 $\tau_s(k_F) = 2/(B_2^2\tau_{k_F}^{\text{ee}})$ 。从这里可以看出自旋轨道耦合中的 λ_c 项扮演了一个净磁场的角色, 不提供非均匀扩展因而也不影响自旋弛豫时间。自旋弛豫时间是由动量依赖的 A_1 项决定的, 它提供了非均匀扩展。进一步考虑到 $|\epsilon_k - \epsilon_{k'}| \sim k_B T$, 我们有 $|B_2| = A_1|k^2 - k'^2|/2 = A_1 m^* |\epsilon_k - \epsilon_{k'}| \approx A_1 m^* k_B T$, 此时自旋弛豫时间变为 $\tau_s(k_F) = 2/(A_1^2 m^{*2} k_B^2 T^2 \tau_{k_F}^{\text{ee}})$ 。这里, k_F 和 k_B 分别表示费米波矢以及 Boltzmann 常数。需要指出的是非均匀扩展 $[A_1^2 m^{*2} k_B^2 T^2 / 2]$ 正比于 T^2 , 这跟半导体中的情况完全不同 [7], 在半导体中自旋轨道耦合提供的非均匀扩展在简并极限下对温度很不敏感。此外在简并极限下, 电子-电子库仑散射导致的动量散射率为 $1/\tau_{k_F}^{\text{ee}} \propto \ln(E_F/k_B T)T^2/E_F$, 其中 E_F 表示费米能 [92]。因此, 在单层 MoS₂ 中自旋弛豫时间 $\tau_s(k_F) \propto \ln(E_F/k_B T)/E_F$, 它随温度的升高而减小。从这里我们可以很清楚地知道自旋弛豫的行为来源于非常特别的自旋轨道耦合 (只依赖于动量大小), 它提供的非均匀扩展抑制了动量散射率随温度升高而变大的趋势。为了检验这个理解, 我们人为地将半导体中自旋轨道耦合对动量角度的依赖去掉后发现体系的自旋弛豫时间在简并区也随温度的升高而变小, 自旋弛豫温度的温度依赖关系中出现的峰也随之消失 (没有在图中给出)。我们进一步将自旋轨道耦合推广到更一般的形式 $A_1 k^n \sigma_z$ ($n \geq 1$), 它引起的非均匀扩展也正比于 T^2 跟 n 的取值无关, 导致的自旋弛豫的行为也跟前面完全一致, 具体的推导见附录 C.2。

接下来我们来讨论一下平面内自旋弛豫时间对电子浓度的依赖。前面讲过 EY 机制对自旋弛豫的贡献可以忽略, 这里我们只计算了 DP 机制下总的自旋弛豫时间以及谷内谷间过程的贡献。选取杂质浓度 $N_i = 0.1N_e$, 不同温度下的结果如图 5-3 所示。我们发现在低温下 ($T = 50$ K), 谷内自旋弛豫过程始终占据主导地位。但是, 在高温下 ($T = 200$ K), 谷间弛豫过程变得更重要。当温度介于两者之间的时候 ($T = 100$ K),

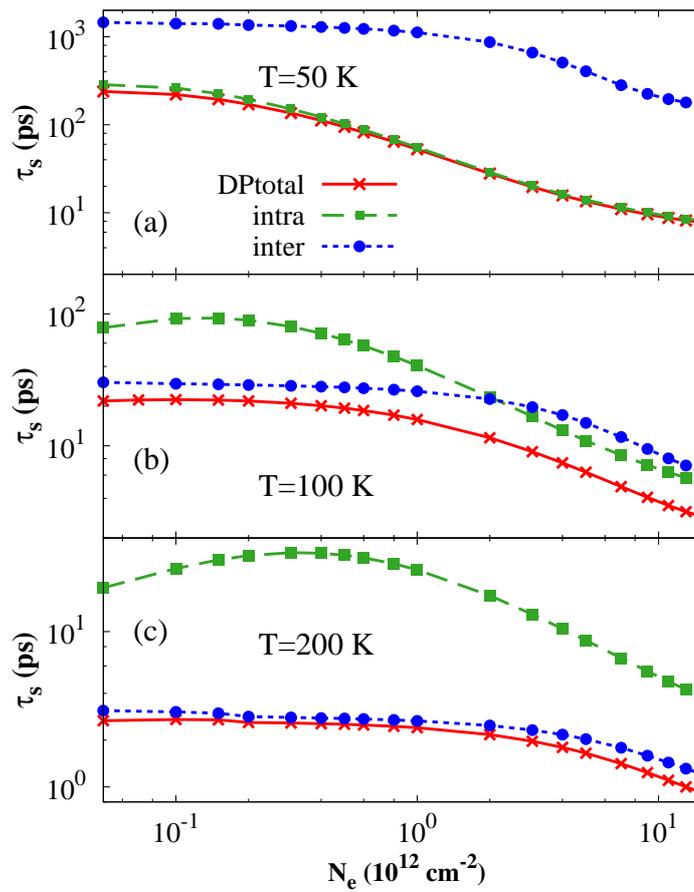


图 5-3: DP 机制下平面内自旋弛豫时间 τ_s (\times) 随电子浓度 N_e 的变化, \blacksquare (\bullet) 表示只有谷内 (谷间) 自旋弛豫过程。(a) 温度 $T = 50$ K; (b) $T = 100$ K; (c) $T = 200$ K。杂质浓度 $N_i = 0.1N_e$ 。摘自文献 [105]。

随着电子浓度的变大，主导的弛豫过程从谷间变化到谷内。此外，我们发现在不同的温度下总的自旋弛豫时间都随电子浓度的增大而变小。总的自旋弛豫时间来自谷内以及谷间弛豫过程的贡献。对于谷间自旋弛豫时间而言，它随电子浓度的变大而单调减小。这是因为谷间电子-声子散射处在弱散射极限下，当电子浓度变大的时候谷间散射增强导致自旋弛豫时间变小 [171]。对于谷内自旋弛豫过程来说，在 $T = 50$ K 的时候自旋弛豫时间随电子浓度增大而减小但是在 $T = 100$ 和 200 K 的时候自旋弛豫时间的浓度依赖关系中出现一个峰，这个峰来源于简并非简并极限的交叉 [102, 260]。在 $T = 50$ K 的时候，谷内和谷间自旋弛豫时间都随电子浓度变大而减小，导致总的自旋弛豫时间也变小。在 $T = 100$ 和 200 K 的时候，谷内自旋弛豫时间的变大会被谷间自旋弛豫时间的减小压制，从而使得总的自旋弛豫时间呈现单调变小的行为。

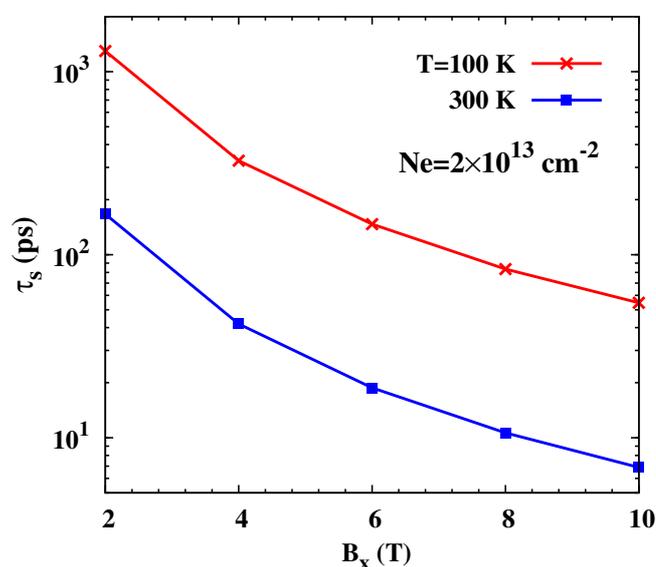


图 5-4: DP 机制下平面外自旋弛豫时间在 $T = 100$ K (\times) 和 $T = 300$ K (\blacksquare) 时随平面内磁场 B_x 的变化。电子浓度 $N_e = 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ，杂质浓度 $N_i = 0.1N_e$ 。摘自文献 [105]。

5.2.3 平面外自旋弛豫

我们还研究了平面外自旋弛豫。由于自旋轨道耦合的有效磁场沿着平面外方向，DP 机制下的平面外自旋弛豫不能发生，这里我们通过施加一个平面内的磁场 B_x 来打开平面外的自旋弛豫通道。我们计算了在 $T = 100$ 和 300 K 时平面外自旋弛豫时间随平面内磁场的变化，具体结果如图 5-4 所示。从图中可以看出平面外自旋弛豫时间随磁场的增加而变小，这是因为平面内磁场混合了平面外和平面内自旋从而导致了平面外自旋极化的自旋弛豫 [101, 261]，跟 (110) 半导体量子阱中施加一个垂直于量子阱生长方向的磁场的情况很类似。此外，我们发现当温度从 $T = 100$ 升高到 300 K 后

平面外自旋弛豫明显加快因为平面内磁场诱导出来的平面内分量在温度较高的时候弛豫得更快，这在前面讨论自旋弛豫的温度依赖关系的时候已经讲过了。需要指出的是我们在 $T = 100$ K 时计算得到的自旋弛豫时间要远长于电子-空穴对的寿命（几皮秒量级 [115]），这支持了 Sallen 等人 [119]观测到的谷极化不随平面内磁场变化的实验结果。

5.3 单层 MoS₂ 中自旋弛豫的最新进展

在章节 5.2 中，我们研究了单层 MoS₂ 中的自旋弛豫，其中导带电子的有效哈密顿量 [参见公式 (5.7) 和 (5.8)] 是从两带哈密顿量 [参见公式 (5.6)] 出发通过块对角化的方法得到的。两带哈密顿量包含了价带和导带的自旋轨道耦合，他们在 K (K') 处的有效磁场方向是相同的，即 $\lambda_v \lambda_c > 0$ 。但是最近 Liu 等人 [262] 和 Kormányos 等人 [263]的理论研究表明价带和导带的自旋轨道耦合的有效磁场在 K (K') 处是反向的，即 $\lambda_v \lambda_c < 0$ ，这跟最近 Zhang 等人 [264]的实验结果一致，因此我们认为这种能带结构可能更合理。这一能带结构的变化会改变公式 (5.8) 中的自旋轨道耦合系数 λ_c ， A_1 以及 A_2 ，具体变为 $\lambda_c = -1.5$ meV， $A_1 = 433.91$ meV Å² 和 $A_2 = 96.06$ meV Å³。此时，公式 (5.8) 中的前两项会相互抵消，当电子浓度较高的时候自旋轨道耦合强度会被非常强烈地压制，可能会影响自旋弛豫的行为。接下来我们根据最近的理论工作提供的参数来重新研究一下单层 MoS₂ 中的自旋弛豫，重点讨论一下跟章节 5.2 中结果不一致的情况。

5.3.1 平面内自旋弛豫

我们先来看一下平面内自旋弛豫的温度依赖关系。图 5-5 中给出了不同电子浓度下平面内自旋弛豫时间随温度的变化。我们发现电子浓度 $N_e = 7 \times 10^{12}$ cm⁻² 的结果跟章节 5.2.2 中的相比在定性行为上完全一致，在定量上也很接近，但是 $N_e = 1.5 \times 10^{13}$ cm⁻² 和 $N_e = 2 \times 10^{13}$ cm⁻²的情况跟章节 5.2.2 中的结果在定性行为上有明显的差别，差别体现在总的自旋弛豫和谷间自旋弛豫过程上，而总的自旋弛豫的差异来源于谷间过程的不一致。接下来我们着重讨论一下谷间自旋弛豫过程。我们先来分析一下 $N_e = 1.5 \times 10^{13}$ cm⁻² 的情况如图 5-5 (b) 所示，发现谷间 (●) 自旋弛豫时间随温度的升高先减小后变大。这个非单调行为跟双层石墨烯中的结果 [参见章节 4.3.1.1] 类似，来源于谷间电子-声子散射在强弱散射之间的交叉。具体来说，这是因为公式 (5.8) 中占据主导地位的前两项互相抵消，使得自旋轨道耦合强度被很强烈地压制。这样一来，当温度较低的时候，谷间电子-声子散射较弱，系统处于弱散射区，但是当温度较高谷间电子-声子散射较强的时候，系统会变到强散射区。当电子浓度进一步增加到 $N_e = 2 \times 10^{13}$ cm⁻² 的时候如图 5-5 (c) 所示，我们也能看到谷间自旋弛豫时间的非单调变化，但是谷间电子-声子散射的强弱散射交叉处向低温区移动，这是因为

浓度升高后自旋轨道耦合强度被进一步压制。

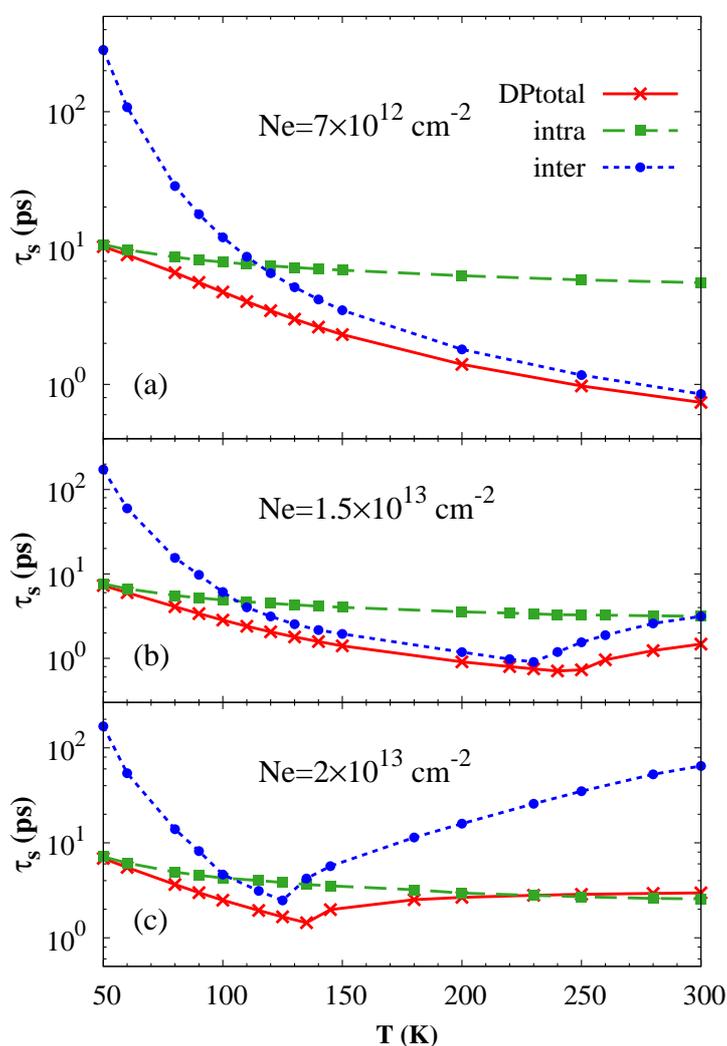


图 5-5: DP 机制下平面内自旋弛豫时间 τ_s (x) 随温度 T 的变化, \blacksquare (\bullet) 表示只有谷内 (谷间) 自旋弛豫过程。(a) 电子浓度 $N_e = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; (b) $N_e = 1.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$; (c) $N_e = 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 。杂质浓度 $N_i = 0.1N_e$ 。

接下来我们来讨论一下平面内自旋弛豫时间对电子浓度的依赖。我们在图 5-6 中给出了不同温度下平面内自旋弛豫时间随电子浓度的变化, 发现跟章节 5.2.2 中的结果相比无论在定性上还是定量上都非常一致, 这里我们不再详细讨论。

5.3.2 平面外自旋弛豫

我们还研究了平面外自旋弛豫。在图 5-7 中我们给出了平面外自旋弛豫时间对平面内磁场的依赖关系, 发现自旋弛豫时间随磁场的增加呈现先减小后变大的行为, 而在章节 5.2.3 中自旋弛豫时间随磁场的增加而单调变小, 两者在磁场较大的时候表现出完全

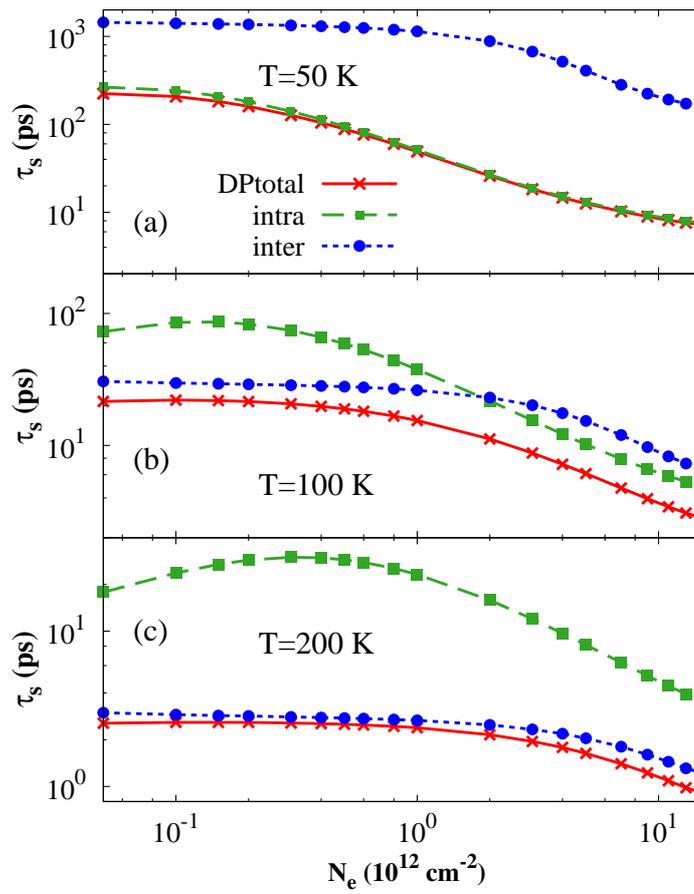


图 5-6: DP 机制下平面内自旋弛豫时间 τ_s (×) 随电子浓度 N_e 的变化, ■ (●) 表示只有谷内 (谷间) 自旋弛豫过程。(a) 温度 $T = 50 \text{ K}$; (b) $T = 100 \text{ K}$; (c) $T = 200 \text{ K}$ 。杂质浓度 $N_i = 0.1N_e$ 。

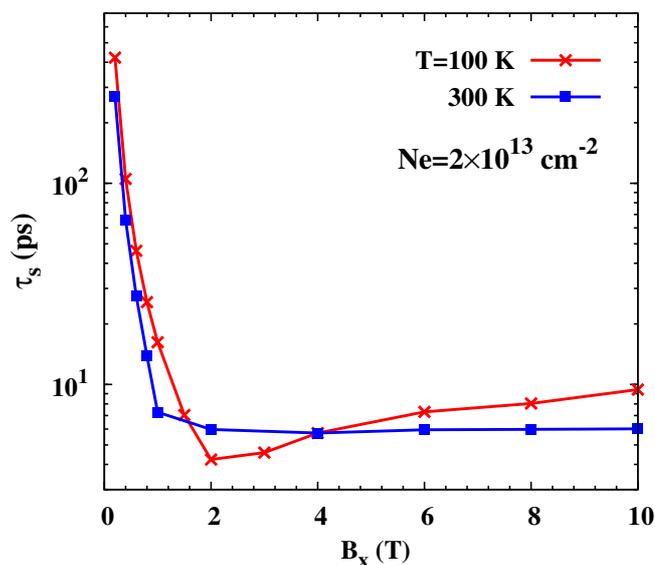


图 5-7: DP 机制下平面外自旋弛豫时间在 $T = 100$ K (\times) 和 $T = 300$ K (\blacksquare) 时随平面内磁场 B_x 的变化。电子浓度 $N_e = 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 杂质浓度 $N_i = 0.1N_e$ 。

相反的行为。接下来我们来分析一下在磁场较大时自旋弛豫时间随磁场变大的物理原因。在上一小节中讲过当电子浓度较大的时候自旋轨道耦合的强度会被很强烈地压制，此时当磁场较大的时候系统就会进入强磁场区，跟 (110) 半导体量子阱中施加一个垂直于量子阱生长方向的磁场的情况很类似 [88, 90]，自旋弛豫时间随磁场的增加而变大。

5.4 小结和讨论

在本章中，我们研究了单层 MoS₂ 中的电子自旋弛豫。我们利用 Löwdin 块对角化的方法得到了 K (K') 点附近最低导带的有效哈密顿量，其中包括了对自旋弛豫起着非常重要作用的自旋轨道耦合项。自旋轨道耦合的主导项（包含谷指标的两项）扮演着类 Zeeman 项的角色，它可以跟谷间电子-声子散射一起导致 DP 机制下的谷间自旋弛豫。这跟弯曲的单层石墨烯和平整的双层石墨烯中的情况类似。此外，自旋轨道耦合还是动量依赖的，它可以引起 DP 机制下的谷内自旋弛豫。出于完整性的考虑我们还计算了由导带价带间自旋混合导致的 EY 自旋弛豫。

我们发现在平面内自旋弛豫中 DP 机制占据主导地位而 EY 机制由于带间自旋混合很小可以忽略。对于 DP 机制而言，谷内自旋弛豫过程在低温下更重要而谷间自旋弛豫过程在高温下成为主导项。当温度介于两者之间的时候，随着电子浓度的变大，主要过程由谷间变到谷内。此外，对于谷间自旋弛豫过程而言，我们发现自旋弛豫时间随温度升高、电子浓度增加以及初始自旋极化变大都表现出单调减小的行为，这是因为谷间电子-声子散射始终处在弱散射区。对于谷内自旋弛豫过程而言，电子-电子库仑散

射始终占据主导地位而电子-杂质散射可以忽略，因为自旋轨道耦合中只有可以忽略的各向异性项才能跟电子-杂质散射导致谷内自旋驰豫。这跟半导体和石墨烯中的情况很不一样。这里需要强调的是单层 MoS_2 中自旋驰豫时间对杂质不敏感在实现自旋电子学器件上是个很大的优势。占据主导地位的电子-电子库仑散射使得谷内自旋驰豫时间在简并区随温度的升高而减小，这跟半导体中的情况完全相反。两者差异的根源在于自旋轨道耦合的形式不同，在半导体中自旋轨道耦合依赖于动量的方向而在单层 MoS_2 中自旋轨道耦合的主导项只跟动量的大小有关。除了平面内自旋驰豫，我们还研究了平面内磁场导致的平面外自旋驰豫，平面外自旋驰豫时间随磁场的增大而减小。这里我们讨论的是单层 MoS_2 中的情况，实际上相关的自旋驰豫机制和过程完全可以推广到单层 MoSe_2 、 WS_2 以及 WSe_2 中去。

在上面的计算中，导带和价带的自旋轨道耦合提供的有效磁场在 K (K') 处是同向的。但是最近的一些理论研究表明在 K (K') 处导带的自旋轨道耦合的有效磁场跟价带的是反向的。我们根据最近的理论工作重新计算了单层 MoS_2 中的自旋驰豫，发现跟上面的结果相比出现了一些新的物理现象。具体来说，对平面内自旋驰豫而言，当电子浓度较高的时候，总的 DP 自旋驰豫时间随温度呈现非单调变化，这是由谷间自旋驰豫过程导致的。对于平面外自旋驰豫来说，自旋驰豫时间随磁场的增加先减小后变大。

除了上面研究的自旋驰豫机制外，单层 MoS_2 中其它因素比如说平面外振动的声学声子模和褶皱等也可能导致自旋驰豫 [211, 265]。先来看一下平面外振动的声学声子引起的自旋翻转散射对自旋驰豫的影响。对自由悬挂的单层 MoS_2 而言，电子的自旋驰豫时间存在争议，不同小组给出的在室温下的自旋驰豫时间差别很大，Ochoa 等人 [265] 的计算结果为 5 ns 但 Song 和 Dery [211] 给出的自旋驰豫时间为 0.05 ps。对于生长在衬底上的单层 MoS_2 来说，自旋驰豫会被非常强烈地压制因为衬底会阻碍晶格的平面外振动 [211, 265]。对于褶皱而言，它引起的电子自旋驰豫时间在 1 ns 量级 [265]。将这两个自旋驰豫机制导致的自旋驰豫时间分别跟我们的数值结果进行比较。可以发现我们研究的自旋驰豫机制要比褶皱引起的来得重要。跟由平面外振动的声学声子导致的自旋驰豫机制相比，在有衬底的情况下我们的更重要但对于自由悬挂的情形自旋驰豫机制的相对重要性还存在争议。

第六章 单层 MoS_2 中的电子自旋扩散

在第 5 章中我们讨论了单层 MoS_2 中的电子自旋弛豫。除了自旋弛豫外，自旋扩散的研究对自旋电子学器件的实现也非常重要。在这一章，我们来介绍一下单层 MoS_2 中电子自旋扩散的相关工作。对于平面外（垂直于单层 MoS_2 的平面）自旋极化而言，自旋扩散长度趋于无穷长，这是因为空间域的自旋进动频率沿着平面外方向。最近，Bishnoi 和 Ghosh [266]发现在体系中施加一个平面外的电场后平面外自旋极化在空间扩散的过程中会发生衰减，在室温下自旋扩散长度为 $0.4 \mu\text{m}$ ，原因在于平面外电场可以诱导出 Rashba 自旋轨道耦合从而使得空间域的自旋进动频率具有平面内分量 [267]。需要指出的是他们的工作中存在很多不足，他们使用的 Rashba 自旋轨道耦合是不完整的（完整的形式可以参见 Kormányos 等人的工作 [258]），那些没有考虑的自旋轨道耦合项很有可能对自旋扩散起着重要的作用。另外，在他们的工作中只考虑了谷内电子-声子散射对自旋扩散的贡献，忽略了电子-电子库仑、电子-杂质以及谷间电子-声子散射的影响。我们知道电子-电子库仑以及电子-杂质散射在半导体 [267–271]和单层石墨烯 [154]中的自旋扩散中扮演着非常重要的角色，谷间电子-声子散射对单层 MoS_2 中的电子自旋弛豫来说很重要 [105, 171]，因此在研究自旋扩散的时候必须要把这些相关的散射都考虑进来。除了平面外的电场以外，平面内的磁场也能导致平面外自旋极化在空间扩散的过程中发生衰减 [267–269, 272]，这是因为平面内磁场可以提供空间域的非均匀扩展（参见章节 2.3）。

我们自己也研究了单层 MoS_2 中的电子自旋扩散 [273]，不过我们关注的是在没有外场（电场和磁场）时平面内自旋扩散的行为。通过解析求解动力学自旋 Bloch 方程 [7]，我们分别研究了谷内和谷间自旋扩散过程，其中谷内（谷间）过程只考虑了电子-杂质（谷间电子-声子）散射。在自旋扩散中谷内过程始终占据主导地位，这跟单层 MoS_2 中时间域的自旋弛豫的情况很不一样，在自旋弛豫中谷间过程可以跟谷内过程相比拟或者甚至比谷内过程更重要 [105]。此外，我们发现平面内自旋扩散长度随杂质（电子）浓度的增加而减小（变大）。非常有意思的是，在谷内自旋扩散过程中进一步考虑电子-电子库仑散射后，平面内自旋扩散长度在非简并极限下随电子浓度的增加而变小，这跟只有电子-杂质散射时的情况完全相反。需要指出的是谷内电子-声子散射对平面内自旋扩散的贡献可以忽略。接下来我们将详细讨论一下这个工作。

6.1 模型和动力学自旋 Bloch 方程

单层 MoS₂ 在 K (K') 点附近最低导带的哈密顿量可以写成 [105]

$$H_{\text{eff}}^{\mu} = \mathbf{k}^2/(2m^*) + \boldsymbol{\Omega}^{\mu} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2, \quad (6.1)$$

自旋轨道耦合提供的有效磁场 $\boldsymbol{\Omega}^{\mu}$ 的具体形式在公式 (5.8) 中已经给过了。由章节 2.3 可知，空间域的自旋进动频率为 [267–269]

$$\boldsymbol{\omega}^{\mu} = \frac{m^* \boldsymbol{\Omega}^{\mu}}{k_x} = m^* \left[\frac{2\lambda_c \mu}{k_x} + \frac{\mu A_1 k^2}{k_x} + A_2 (k_x^2 - 3k_y^2) \right] \hat{\mathbf{z}}, \quad (6.2)$$

这里假设自旋极化沿着 x 方向扩散。由于 k_x^{-1} 的存在，自旋进动频率中的所有项都是动量依赖的，它们会使平面内自旋在扩散的过程中发生谷内和谷间驰豫，这跟时间域中自旋驰豫的情况不同 [105]。需要强调的是自旋进动频率中所有项不仅是动量依赖的还是各向异性的，这意味着电子-杂质散射可能对平面内自旋扩散起着非常重要的作用，跟单层 MoS₂ 中时间域的自旋驰豫中电子-杂质散射的贡献可以忽略形成了鲜明的对比 [105]但是跟半导体 [267–269]和单层石墨烯 [271]中的情况类似。

接下来我们构造动力学自旋 Bloch 方程来研究单层 MoS₂ 中的电子自旋扩散 [7]。方程包括了相干进动项、散射项以及空间扩散项，具体形式在章节 2.1 中已经给过了。对于散射项而言，我们忽略了由导带价带自旋混合导致的自旋翻转散射，因为带间自旋混合太小了，这在章节 5.2.2 中已经讲过了。这里，我们只考虑自旋守恒散射包括电子-杂质、电子-电子库仑、谷内电子-声子以及谷间电子-声子散射，其中电子-杂质、电子-电子库仑和谷内电子-声子散射导致谷内自旋扩散过程而谷间电子-声子散射引起谷间过程，需要指出的是在谷内过程中谷内电子-声子散射的贡献可以忽略。电子-电子库仑和谷间电子-声子散射矩阵元的具体形式分别在章节 5.2.1 和章节 5.1.1 中给出了，电子-杂质散射矩阵元在杂质电荷数取为 1 的时候跟电子-电子库仑散射的一样 [171]。对于空间扩散项来说，我们假设平面内自旋极化沿着 x 方向扩散，需要说明的是由于自旋轨道耦合中 $A_2(k_x^3 - 3k_x k_y^2)\sigma_z$ 项对自旋扩散的贡献非常小，我们可以近似认为沿着平面内各个方向的扩散是等价的。

6.2 解析研究

6.2.1 谷内自旋扩散过程

我们先来解析研究一下平面内自旋扩散的谷内过程，散射项中只考虑了电子-杂质

散射。在稳态条件下，动力学自旋 Bloch 方程为

$$\frac{k_x}{m^*} \partial_x \rho_{\mu\mathbf{k}}(x) = -\frac{i}{2} [(2\lambda_c + A_1 k^2) \sigma_z, \rho_{\mu\mathbf{k}}(x)] - \pi N_i \left[\sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^2 (\rho_{\mu\mathbf{k}} - \rho_{\mu\mathbf{k}'}) \right. \\ \left. \times \delta(\epsilon_{\mu\mathbf{k}} - \epsilon_{\mu\mathbf{k}'}) + \text{H.c.} \right], \quad (6.3)$$

$$(6.4)$$

其中 N_i 表示杂质浓度， $U_{\mathbf{q}}^2 = [V_{\mathbf{q}}^{(0)}/\epsilon(\mathbf{q})]^2$ 是电子-杂质散射矩阵元， $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ ， $V_{\mathbf{q}}^{(0)} = 2\pi e^2/(\kappa q)$ 为裸的二维库仑势， $\epsilon(\mathbf{q})$ 表示随机相位近似下的屏蔽 [246]，在简并极限下 $\epsilon(\mathbf{q}) = 1 + 2m^* V_{\mathbf{q}}^{(0)}/\pi$ 而在非简并极限下 $\epsilon(\mathbf{q}) = 1 + N_e V_{\mathbf{q}}^{(0)}/(k_B T)$ ， N_e 和 T 分别代表电子浓度和温度。需要指出的是谷指标 μ 被去掉了因为这里考虑的是谷内自旋扩散过程，另外自旋轨道耦合 Ω^μ 中的各向异性项也被忽略了因为它对自旋扩散的贡献要远小于其它两项。

利用 $\rho_{\mathbf{k}}^l = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} e^{-il\theta_{\mathbf{k}}}$ 可得

$$\frac{k}{2m^*} \partial_x [\rho_{\mathbf{k}}^{l+1}(x) + \rho_{\mathbf{k}}^{l-1}(x)] = -\frac{i}{2} [(2\lambda_c + A_1 k^2) \sigma_z, \rho_{\mathbf{k}}^l(x)] - \rho_{\mathbf{k}}^l(x)/\tau_i^l, \quad (6.5)$$

这里， $1/\tau_i^l = N_i m^* \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{q}}^2 (1 - \cos l\theta_{\mathbf{k}})/(2\pi)$ 表示第 l 阶动量散射率。最近的实验报道生长在 SiO₂ 衬底上的单层 MoS₂ 在室温下的迁移率在 0.1-10 cm²V⁻¹s⁻¹ 量级 [184, 185, 187]。通过拟合这些实验中测到的迁移率，我们可以得到体系的杂质浓度比如说 $N_i = 4.4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 对应迁移率 10 cm²V⁻¹s⁻¹。在这些杂质浓度下，电子-杂质散射处在强散射区即 $\langle |2\lambda_c + A_1 k^2| \rangle \tau_i^1 \ll 1$ （比如说 $\sim 10^{-2}$ ，相应的杂质浓度为 $N_i = 4.4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ）， $\langle \dots \rangle$ 表示系综平均。此时，我们可以只保留 $|l|$ 的最低两阶即 $|l| = 0, 1$ ，上面的方程变为

$$\frac{k}{2m^*} \partial_x [\rho_{\mathbf{k}}^1(x) + \rho_{\mathbf{k}}^{-1}(x)] = -\frac{i}{2} [(2\lambda_c + A_1 k^2) \sigma_z, \rho_{\mathbf{k}}^0(x)], \quad (6.6)$$

$$\frac{k}{2m^*} \partial_x \rho_{\mathbf{k}}^0(x) = -\frac{i}{2} [(2\lambda_c + A_1 k^2) \sigma_z, \rho_{\mathbf{k}}^1(x)] - \rho_{\mathbf{k}}^1(x)/\tau_i^1, \quad (6.7)$$

$$\frac{k}{2m^*} \partial_x \rho_{\mathbf{k}}^0(x) = -\frac{i}{2} [(2\lambda_c + A_1 k^2) \sigma_z, \rho_{\mathbf{k}}^{-1}(x)] - \rho_{\mathbf{k}}^{-1}(x)/\tau_i^1. \quad (6.8)$$

通过简单计算容易得到关于 $\rho_{\mathbf{k}}^0(x)$ 的二阶微分方程 [271, 272, 274]，

$$\partial_x^2 \rho_{\mathbf{k}}^0(x) = -[\sigma_z, [\sigma_z, \rho_{\mathbf{k}}^0(x)]] c_1^2/2 + i c_2 [\sigma_z, \rho_{\mathbf{k}}^0(x)], \quad (6.9)$$

其中 $c_1 = (2\lambda_c + A_1 k^2) m^*/k$ ， $c_2 = (2\lambda_c + A_1 k^2) m^{*2}/(k^2 \tau_i^1)$ 。我们定义自旋极化矢量 $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(x) \equiv \text{Tr}[\rho_{\mathbf{k}}^0(x) \boldsymbol{\sigma}]$ ，利用边界条件可以求解出 $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(x)$ 。这里我们不失一般性地选取初始自旋极化沿着 x 方向，因为平面内自旋是各向同性的，此时初始边界条件

为 $\mathbf{S}_k(0) = (S_k(0), 0, 0)$, $\mathbf{S}_k(+\infty) = 0$, 经过一些计算后可得

$$S_k^x(x) = S_k(0) \cos(\omega_{\text{intra}}^{\text{in}} x) e^{-x/l_{\text{intra}}^{\text{in}}}, \quad (6.10)$$

$$\omega_{\text{intra}}^{\text{in}} = \sqrt{\sqrt{c_1^4 + c_2^2} + c_1^2}, \quad (6.11)$$

$$1/l_{\text{intra}}^{\text{in}} = \sqrt{\sqrt{c_1^4 + c_2^2} - c_1^2}. \quad (6.12)$$

这里, $l_{\text{intra}}^{\text{in}}$ 就是谷内自旋扩散长度。

需要指出的是在我们的计算中用到的自旋轨道项 $(2\lambda_c + A_1 k^2)\sigma_z$ 实际上扮演着一个外加磁场的角色因为在电子-杂质散射的过程中该自旋轨道耦合项始终保持不变, 但是它可以提供空间域的非均匀扩展, 这跟 Zhang 和 Wu 研究的 Si/SiGe 量子阱中的自旋扩散过程非常类似, 在他们的工作中外加磁场提供了空间域的非均匀扩展 [272]。

6.2.2 谷间自旋扩散过程

我们再来解析研究一下平面内自旋扩散的谷间过程, 散射项中只考虑了谷间电子-声子散射。在稳态条件下, 动力学自旋 Bloch 方程具有以下形式

$$\begin{aligned} \frac{k_x}{m^*} \partial_x \rho_{\mu\mathbf{k}}(x) &= -\frac{i}{2} [(2\lambda_c + A_1 k^2) \mu \sigma_z, \rho_{\mu\mathbf{k}}(x)] - \pi \left\{ \sum_{\mu'\mathbf{k}'\pm} |M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}|^2 \right. \\ &\quad \left. \times \delta(\epsilon_{\mu'\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mu\mathbf{k}} \pm \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}) [N_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^\pm (1 - \rho_{\mu'\mathbf{k}'}) \rho_{\mu\mathbf{k}} - N_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^\mp \rho_{\mu'\mathbf{k}'} (1 - \rho_{\mu\mathbf{k}})] + \text{H.c.} \right\}, \end{aligned} \quad (6.13)$$

其中电子-声子散射矩阵元 $|M_{\mu\mathbf{k},\mu'\mathbf{k}'}|^2 = M_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^2 \delta_{\mu',-\mu}$, $w_{\mathbf{q}}$ 表示声子能量, $N_{\mathbf{q}}^\pm = N_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}$, $N_{\mathbf{q}}$ 是声子数目, 对于 K (K') 点处的声子而言 $N_{\mathbf{q}}$ 是一个跟 \mathbf{q} 无关的常数 (记为 N_{ph})。在弹性散射近似下 [158, 170, 171], 上面的方程变为

$$\begin{aligned} \frac{k_x}{m^*} \partial_x \rho_{\mu\mathbf{k}}(x) &= -\frac{i}{2} [(2\lambda_c + A_1 k^2) \mu \sigma_z, \rho_{\mu\mathbf{k}}(x)] - (2N_{\text{ph}} + 1) \pi \left[\sum_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^2 \right. \\ &\quad \left. \times \delta(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}}) (\rho_{\mu\mathbf{k}} - \rho_{-\mu\mathbf{k}'}) + \text{H.c.} \right]. \end{aligned} \quad (6.14)$$

利用 $\rho_{\mu\mathbf{k}}^l = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}} \rho_{\mu\mathbf{k}} e^{-il\theta_{\mathbf{k}}}$ 可得

$$\begin{aligned} \frac{k}{2m^*} \partial_x [\rho_{\mu\mathbf{k}}^{l+1}(x) + \rho_{\mu\mathbf{k}}^{l-1}(x)] &= -\frac{i(2\lambda_c + A_1 k^2) \mu}{2} [\sigma_z, \rho_{\mu\mathbf{k}}^l(x)] \\ &\quad - [\rho_{\mu\mathbf{k}}^l(x)/\tau_v^0 - \rho_{-\mu\mathbf{k}}^l(x)/\tau_v^l]. \end{aligned} \quad (6.15)$$

这里, $1/\tau_v^l = (2N_{\text{ph}} + 1)m^* \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}} M_{\mathbf{q}}^2 \cos l\theta_{\mathbf{k}} / (2\pi)$ 是第 l 阶谷间动量散射率。需要指出的是不同于电子-杂质散射, 谷间电子-声子散射处在弱散射区即 $|(2\lambda_c + A_1 k^2)| |\tau_v^{0,1}| \gg 1$ [171], 这表明 $\rho_{\mu\mathbf{k}}^l$ 的高阶项可能会对谷间自旋扩散过程有作用。为了简单起见, 我们仍

然先保留 $|l| = 0, 1$ ，上面的方程变为

$$\frac{k}{2m^*} \partial_x [\rho_{\mu k}^1(x) + \rho_{\mu k}^{-1}(x)] = -\frac{i(2\lambda_c + A_1 k^2)\mu}{2} [\sigma_z, \rho_{\mu k}^0(x)] - [\rho_{\mu k}^0(x)/\tau_v^0 - \rho_{-\mu k}^0(x)/\tau_v^1], \quad (6.16)$$

$$\frac{k}{2m^*} \partial_x \rho_{\mu k}^0(x) = -\frac{i(2\lambda_c + A_1 k^2)\mu}{2} [\sigma_z, \rho_{\mu k}^1(x)] - [\rho_{\mu k}^1(x)/\tau_v^0 - \rho_{-\mu k}^1(x)/\tau_v^1], \quad (6.17)$$

$$\frac{k}{2m^*} \partial_x \rho_{\mu k}^0(x) = -\frac{i(2\lambda_c + A_1 k^2)\mu}{2} [\sigma_z, \rho_{\mu k}^{-1}(x)] - [\rho_{\mu k}^{-1}(x)/\tau_v^0 - \rho_{-\mu k}^{-1}(x)/\tau_v^1]. \quad (6.18)$$

通过计算可得关于 $\rho_{\mu k}^0(x)$ 的二阶微分方程 [271, 272, 274]

$$\partial_x^2 \rho_{\mu k}^0(x) = -[\sigma_z, [\sigma_z, \rho_{\mu k}^0(x)]]c_1^2/2 + ic_3\mu[\sigma_z, 2\rho_{\mu k}^0(x) - \rho_{-\mu k}^0(x)c_4], \quad (6.19)$$

其中 $c_3 = (2\lambda_c + A_1 k^2)m^{*2}/(k^2\tau_v^0)$ ， $c_4 = 1 - \tau_v^0/\tau_v^1$ 。我们定义自旋极化矢量 $\mathbf{S}_{\mu k}(x) \equiv \text{Tr}[\rho_{\mu k}^0(x)\boldsymbol{\sigma}]$ ，选取初始自旋极化沿着 x 方向，相应的边界条件为 $\mathbf{S}_{\mu k}(0) = (S_k(0), 0, 0)$ 以及 $\mathbf{S}_{\mu k}(+\infty) = 0$ ，经过计算后可得

$$\sum_{\mu} S_{\mu k}^x(x) = 2S_k(0) \cos(\omega_{\text{inter}}^{\text{in}} x) e^{-x/l_{\text{inter}}^{\text{in}}}, \quad (6.20)$$

$$\omega_{\text{inter}}^{\text{in}} = \sqrt{2}c_1, \quad (6.21)$$

$$1/l_{\text{inter}}^{\text{in}} = c_3 \sqrt{4 - c_4^2}/(\sqrt{2}c_1). \quad (6.22)$$

这里， $l_{\text{inter}}^{\text{in}}$ 即为谷间自旋扩散长度。我们将 $\rho_{\mu k}^l$ 的高阶项 ($|l| > 1$) 考虑进来后发现谷间自旋扩散长度变化不是很明显，具体来说，保留到 $|l| \leq 2$ 的谷间自旋扩散长度跟保留到 $|l| \leq 1$ 的相对误差为 18%，保留到 $|l| \leq 3$ 的谷间自旋扩散长度跟保留到 $|l| \leq 2$ 的相对误差只有 6%。

6.2.3 结果

我们先来看一下简并极限下的情况。此时，谷内和谷间自旋扩散长度分别为 $l_{\text{intra}}^{\text{in}}(k_F)$ 和 $l_{\text{inter}}^{\text{in}}(k_F)$ ， k_F 是 Fermi 波矢。为了比较谷内和谷间自旋扩散过程的相对重要性，我们计算了自旋扩散长度的比值如下

$$\frac{l_{\text{intra}}^{\text{in}}(k_F)}{l_{\text{inter}}^{\text{in}}(k_F)} = \frac{c_3}{\sqrt{2}c_1} \sqrt{4 - c_4^2} / \sqrt{\sqrt{c_1^4 + c_2^2} - c_1^2}. \quad (6.23)$$

根据前面的讨论可知，电子-杂质散射处在强散射区即 $c_1^2 \ll c_2$ 而谷间电子-声子散射处在弱散射区即 $c_1^2 \gg c_3$ ，利用这两个条件可得 $l_{\text{intra}}^{\text{in}}(k_F) \ll l_{\text{inter}}^{\text{in}}(k_F)$ 。这表明谷内自旋扩散过程始终占据主导地位，这跟单层 MoS₂ 中时间域的自旋驰豫的情况很不一样，在自旋驰豫中谷间过程可以跟谷内过程相比拟，有的时候甚至可以比谷内过程还重

要 [105]。接下来我们只研究谷内自旋扩散过程。

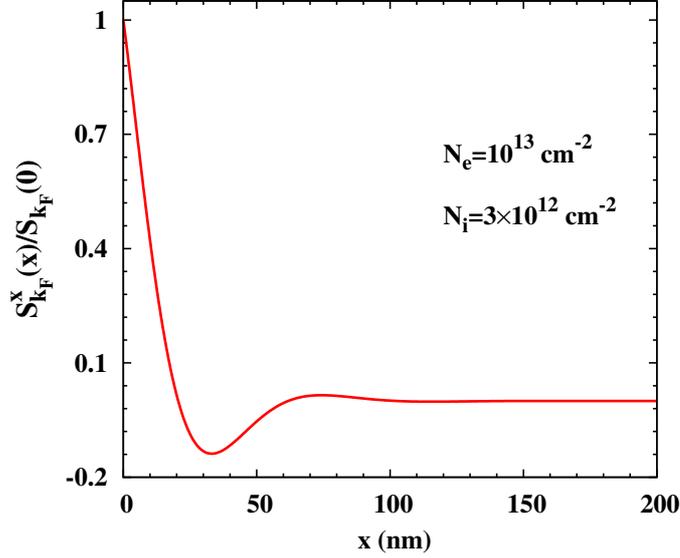


图 6-1: 只有电子-杂质散射的情况下, 稳态时的平面内自旋信号 $S_{k_F}^x(x)/S_{k_F}^x(0)$ 随位置 x 的变化。电子浓度 $N_e = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 杂质浓度 $N_i = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 。摘自文献 [273]。

在简并区平面内自旋矢量的稳态空间分布近似为 $S_{k_F}^x(x)$ [参见公式 (6.10)], 我们在图 6-1 中给出了 $S_{k_F}^x(x)/S_{k_F}^x(0)$ 随位置 x 的变化, 这里只考虑了电子-杂质散射, 杂质浓度选为 $N_i = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 使得电子-杂质散射处在强散射区, 相应的迁移率在 $10^2 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 量级比实验中的测量值要大一到两个量级 [184, 185, 187]。从图中可以看出自旋信号在扩散的过程中表现出明显的衰减, 这来源于空间域的自旋进动频率提供的非均匀扩展。为了更清楚地研究自旋信号的衰减, 我们来分析一下它对应的特征量即自旋扩散长度 [参见公式 (6.12)]。

在图 6-2 (a) 中我们给出了在简并条件下平面内自旋扩散长度随电子浓度的变化, 可以看出由电子-杂质散射导致的自旋扩散长度 (带有 \times 的曲线) 随电子浓度的增加而变大。这可以从解析公式上来理解。谷内自旋扩散长度在强散射条件 ($c_1^2 \ll c_2$) 下可以近似为

$$l_{\text{intra}}^{\text{in}}(k_F) = 1/\sqrt{c_2} \quad (6.24)$$

在简并条件下当电子浓度增加的时候, 费米波矢 k_F 和电子-杂质散射时间 τ_i^1 都变大 [104], 这使得 c_2 减小导致自旋扩散长度变大。除了电子-杂质散射, 我们还考虑了电子-电子库仑散射的影响, 需要指出的是谷内电子-声子散射的贡献可以忽略这里不予考虑 [105]。跟时间域的自旋弛豫中的做法一样 [7, 92], 我们在计算平面内自旋扩散长度的时候用有效动量散射率 $1/\tau^* = 1/\tau_i^1 + 1/\tau_{ee}$ 来替代电子-杂质散射引起的动量散射

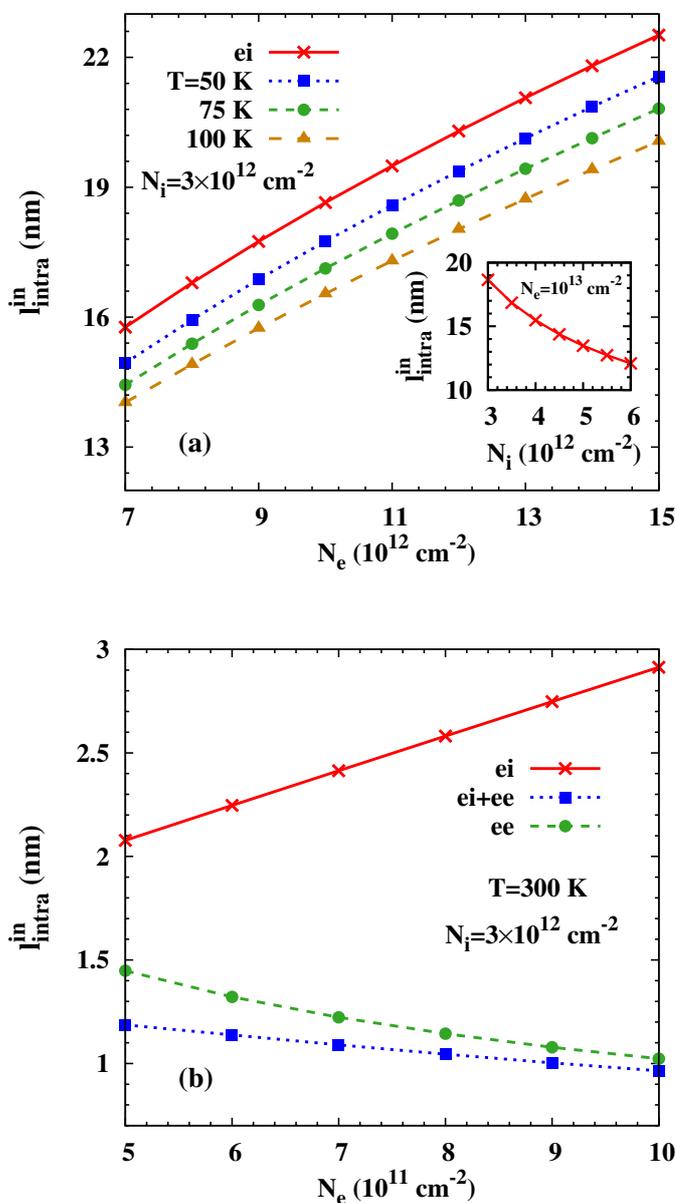


图 6-2: (a) 在简并极限下谷内自旋扩散长度 l_{intra}^{in} 随电子浓度 N_e 的变化。带有 \times 的曲线表示只考虑了电子-杂质散射的情况而带有 \blacksquare , \bullet 和 \blacktriangle 的曲线分别代表进一步考虑了电子-电子库仑散射后在 $T = 50, 75$ 以及 100 K 的结果。杂质浓度 $N_i = 3 \times 10^{12}$ cm $^{-2}$ 。在插图中给出了由电子-杂质散射导致的 l_{intra}^{in} 随杂质浓度 N_i 的变化, 电子浓度取为 $N_e = 10^{13}$ cm $^{-2}$; (b) 在非简并极限下 l_{intra}^{in} 随 N_e 的变化。带有 \times (\bullet) 的曲线表示只考虑了电子-杂质散射 (电子-电子库仑散射) 的情况而带有 \blacksquare 曲线对应的是同时包括了电子-杂质和电子-电子库仑散射的情况。 $N_i = 3 \times 10^{12}$ cm $^{-2}$, $T = 300$ K。摘自文献 [273]。

率 $1/\tau_i^1$ 。这里， $\tau_{ee}^{-1} = (\pi/4) \ln(E_F/k_B T) k_B^2 T^2 / E_F$ 表示电子-电子库仑散射导致的动量散射率， E_F 是体系的费米能 [92]。我们在图 6-2 (a) 中给出了 $T = 50, 75$ 以及 100 K 时的结果。将这些结果跟只有电子-杂质散射时的（带有 \times 的曲线）做比较可以发现电子-杂质散射在自旋扩散的过程中占据主导地位，这跟单层 MoS₂ 中时间域的自旋弛豫的情况很不一样，在自旋弛豫中电子-杂质散射的贡献非常小 [105]。原因其实很简单，在空间域中自旋进动频率的所有项都能跟电子-杂质散射一起导致自旋衰减而在时间域中只有自旋轨道耦合中可忽略的各向异性项才能跟电子-杂质散射一起引起自旋弛豫。此外，我们发现当固定电子浓度不变的时候平面内自旋扩散长度随温度的升高而减小，这是因为电子-电子库仑散射在简并区随温度的升高而增强 [参见公式 (6.24)] [92]。我们还研究了平面内自旋扩散长度随杂质浓度的变化，结果如图 6-2 (a) 中插图所示，这里只考虑了电子-杂质散射的贡献。可以看出自旋扩散长度随杂质浓度的增加而变小，这从公式 (6.24) 出发很容易理解。

我们再来看一下非简并极限下的情况。谷内和谷间自旋扩散长度分别近似为 $l_{\text{intra}}^{\text{in}}(k_T)$ 和 $l_{\text{inter}}^{\text{in}}(k_T)$ ，其中 $k_T = \sqrt{2m^*k_B T}$ [92]。跟简并极限下的情况类似，在非简并极限下平面内自旋扩散也是由谷内过程主导的。在杂质浓度选为 $N_i = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 的时候，我们计算了由电子-杂质散射导致的谷内自旋扩散长度 $l_{\text{intra}}^{\text{in}}(k_T)$ 随电子浓度的变化如图 6-2 (b) 中带有 \times 的曲线所示。从图中可以看出自旋扩散长度随电子浓度的增加而变大，这是因为在非简并区随着电子浓度的增大屏蔽逐渐变大导致电子-杂质散射逐渐变弱 [参见公式 (6.24)]。我们进一步考虑电子-电子库仑散射的影响，它在非简并极限下导致的动量散射率为 $1/\tau_{ee} = 35.7e^4 N_e / (\kappa^2 k_B T)$ [92]，这跟单并极限的情况不一样。自旋扩散长度随电子浓度的依赖关系如图 6-2 (b) 中带有 \blacksquare 的曲线所示，可以看出随着电子浓度的增大自旋极化在扩散的过程中衰减得更快，跟只有电子-杂质散射的情况是相反的。为了理解这个行为，我们计算了只有电子-电子库仑散射的情况如图 6-2 (b) 中带有 \bullet 的曲线所示，发现自旋扩散长度随电子浓度的增大而减小，这是电子-电子库仑散射变强的结果。通过比较可以看出电子-电子库仑散射在自旋扩散中占据更重要的地位，它压制了电子-杂质散射对自旋扩散的影响。这跟单并极限下电子-杂质散射占据主导地位的情况有所不同。

需要指出的是无论在简并还是非简并极限下自旋扩散长度都随着散射的增强而减小，这跟时间域中自旋弛豫时间在弱散射的行为类似 [7]。这是因为空间域的自旋进动频率正比于 k_x^{-1} ，它可以提供非常强的非均匀扩展。类似的行为还可以在对称的硅量子阱中由外加磁场引起的自旋扩散中看到 [272]，因为自旋进动频率的动量依赖跟单层 MoS₂ 中的类似。

6.3 小结

在本章中，我们详细讨论了在没有外加电场和磁场时单层 MoS₂ 中的电子自旋扩散。空间域中各向异性的自旋进动频率使得电子-杂质散射在平面内自旋扩散的过程中

起着非常重要的作用，这跟单层 MoS₂ 中在时间域的自旋弛豫中电子-杂质散射可忽略形成了鲜明的对比。我们通过解析求解动力学自旋 Bloch 方程研究了平面内自旋扩散的谷内和谷间过程，其中谷内（谷间）过程中只考虑了电子-杂质（谷间电子-声子）散射。比较谷内和谷间自旋扩散长度可知谷内自旋扩散过程始终占据主导地位，跟单层 MoS₂ 中在时间域的自旋弛豫中的情况很不一样，在自旋弛豫中谷间过程可以跟谷内过程相比拟，有的时候甚至可以比谷内过程更重要。在占据主导地位的谷内过程中，我们发现自旋扩散长度随杂质浓度的增加而减小但是随电子浓度的变大而增大。非常有意思的是，进一步考虑电子-电子库仑散射后，自旋扩散长度在非简并极限下随电子浓度变大而减小，跟只有电子-杂质散射的情况完全相反。

第七章 拓扑超导体以及 Majorana 费米子背景介绍

7.1 引言

Majorana 费米子的概念是由 Ettore Majorana 在 1937 年提出来的 [275]。它与普通费米子不同，是自身的反粒子，呈现电中性。Majorana 费米子最早被认为可能是一种基本粒子，相关的研究主要是在粒子物理领域。后来实验发现，在标准模型中的所有费米子中除了电中性的中微子外都是普通费米子，至于中微子是普通费米子还是 Majorana 费米子目前还没有定论。除了粒子物理领域中的基本粒子之外，最近人们发现 Majorana 费米子还可能作为单粒子元激发（准粒子）存在于凝聚态物理系统中 [276–280]。在凝聚态领域中，最常见的费米子系统是电子系统。由于 Majorana 费米子是电中性的，电子系统必须是超导体，这是因为超导体中单粒子元激发是电子跟空穴的组合，有可能为电中性。此外，超导体还具有粒子-空穴对称性，因而一个准粒子总是跟一个与之能量相反的准粒子成对出现，且它们对应的算符满足 $\gamma^\dagger(E) = \gamma(-E)$ [281]。特别的，当超导体中存在零能准粒子的时候， $\gamma^\dagger(0) = \gamma(0)$ ，该准粒子是 Majorana 费米子。所以，在超导体中，Majorana 费米子跟零能元激发是一一对应的关系。一般而言，超导体中很难存在零能元激发（比如传统的 s 波超导体），即使存在也很容易被杂质等外在因素破坏。但对一类特殊的超导体而言，零能元激发（Majorana 费米子）很自然地在超导体的边界或者量子涡旋处出现，并且是受拓扑保护的，我们称这类超导体为拓扑超导体 [276–280, 282, 283]。因此找到拓扑超导体就意味着 Majorana 费米子的实现。拓扑超导体最早是在无自旋手征 p 波超导体模型中提出的 [276, 282, 283]，由于体系具有非平凡的拓扑性质，理论上发现 Majorana 费米子可以出现在边界或者量子涡旋处（参见章节 7.3.1）。在实际体系中，理论上预言 Sr_2RuO_4 是带自旋的手征 p 波超导体（本征拓扑超导体） [284, 285]，但是实验上到现在还没有定论。

由于寻找本征拓扑超导体很困难，最近人们改变思路开始设计人造拓扑超导体 [286–313]。目前为止，大部分工作集中在合成系统中实现有效 p 波超导体 [287–311]。有效 p 波超导体的想法是 Fu 和 Kane 在 2008 年提出来的 [288]。他们把强的拓扑绝缘体 [279, 280] 跟传统 s 波超导体贴在一起（参见图 7-1 左图），这样由于近邻效应拓扑绝缘体的二维表面态就会感受到 s 波的超导配对。这种人造超导体在拓扑上等价于无自旋 p 波超导体，可以表现出类似无自旋 p 波超导体的行为，在体系的边界或者量子涡旋处可以产生 Majorana 费米子（参见章节 7.3.2），现在一般被称为有

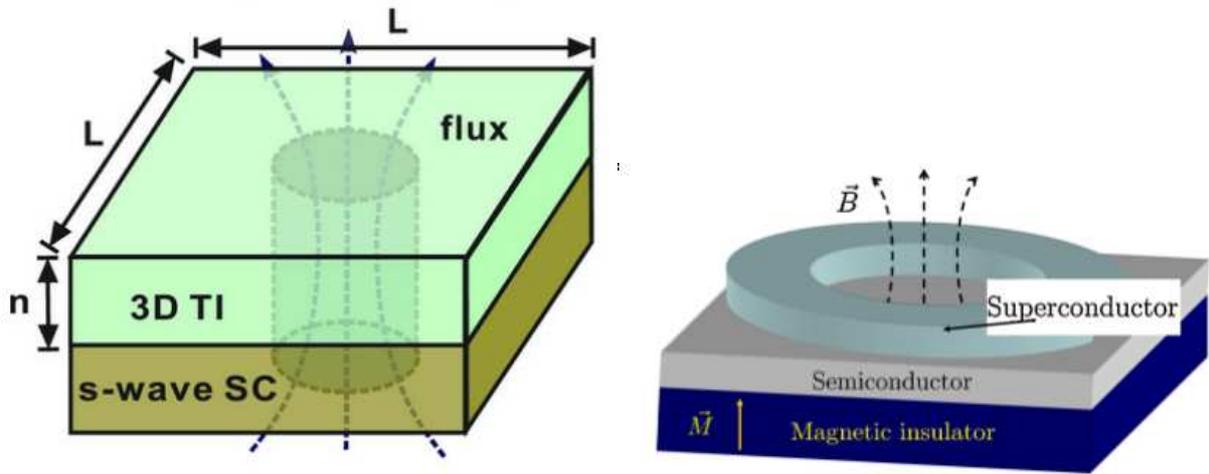


图 7-1: 左图: 拓扑绝缘体和传统 s 波超导体贴在一起。摘自文献 [286]。右图: 具有强自旋轨道耦合的半导体二维电子气置于 s 波超导体跟磁性绝缘体之间。摘自文献 [287]。

效 p 波超导体。有效 p 波超导体实现起来更容易，可操作性更强，可以很好地替代本征拓扑超导体。在这之后，有效 p 波超导体以及 Majorana 费米子受到了极大关注 [287, 289–311]。Das Sarma 小组提出了一个更简单的方案 [287, 289]（参见图 7-1 右图），他们用具有强 Rashba 自旋轨道耦合 [44] 的半导体二维电子气取代上面方案中的强拓扑绝缘体表面态，并在半导体的另一个表面贴上了磁性绝缘体用于破坏时间反演对称性（参见章节 7.3.3）。当交换场引起的塞曼劈裂大于化学势的时候，体系存在单个费米面（有关奇数个费米面的要求会在章节 7.3.3 中具体讨论）。这个费米面处的超导配对等价于 p 波配对，此时体系表现出有效 p 波超导体的行为，在边界或者量子涡旋处产生 Majorana 费米子。在这个方案的基础上，Alicea 提出可以进一步改进，用外加磁场替代磁性绝缘体，这样调控起来更方便 [290]。但是垂直于半导体二维平面的磁场会不可避免地引起轨道效应有可能会破坏体系的拓扑性质，而平面内的磁场虽然不用考虑轨道效应却无法在有 Rashba 自旋轨道耦合的半导体二维电子中得到单个费米面。要想得到单个费米面，必须要求外加磁场有一个垂直于自旋轨道耦合有效磁场的分量。沿 (110) 方向生长的半导体可以解决这个问题，这是因为 Dresselhaus 自旋轨道耦合有效磁场 [85] 沿着生长方向与二维平面内的外加磁场垂直。随后，Das Sarma 小组也对自己原先的方案提出了改进方法，用半导体一维纳米线替代原先的二维电子气以及用外加磁场取代磁性半导体（参见图 7-2 左图），此时在纳米线的两端可以出现 Majorana 费米子 [289]（参见章节 7.3.3）。很显然，半导体一维纳米线的方案比之前 Alicea 提出的更简单，更具一般性。这个方案已经被实验实现，目前观测到了一些 Majorana 费米子出现的迹象，比如输运测量上有零偏压电导峰 [295]（参见章节 7.3.3）。要确定为 Majorana 费米子，还需要排除其它因素的干扰比如杂质等，更重要的是还要能够进行空间分辨从而确定在边界处有局域态。为了解决这些问题，Yazdani 小组在实验上巧妙地设计了一个实现一维拓扑超导体的新的平台（参见图 7-2 右图），他们在具有强

自旋轨道耦合的传统 s 波超导体表面生长出一维铁磁原子链 [305] (参见章节 7.3.4)。与纳米线相比, 铁磁原子链中大的交换场使得被占据的费米面数目始终是奇数, 这极大地简化了实验, 可以不用精细地调节实验参数就能在端点处产生 Majorana 费米子。实验上利用扫描隧穿显微镜进行空间分辨测量, 发现只有在端点处才出现零偏压电导峰, 这就证明了在边界处有零能局域态的存在。另外当传统超导体中的超导性被抑制后, 实验发现端点处的零偏压电导峰也随之消失, 这很好地排除了外在因素的干扰。这些都为 Majorana 费米子的存在提供了强有力的证据。但是实验上也存在一些不足, 需要进一步改进。实验温度跟实验估算得到的拓扑超导能隙非常接近, 这会使得有关 Majorana 费米子的存在的结论变得不可靠, 因为 Majorana 费米子会扩展到整个能隙中甚至能隙之外以至于很难与普通费米子区分开 [308]。这就要求在以后的实验中需要降低温度或者提高体系的超导能隙。最近, 一些理论工作把一维铁磁原子链扩展到二维铁磁格子, 他们发现在二维体系边界处能够出现多个 Majorana 费米子, 具体数目是由体系的 Chern 数来决定的 [310,311] (参见章节 7.3.4)。除了上面被广泛研究的方案外, 还有一些其它的实现有效 p 波超导体的方案 (参见章节 7.3.5)。

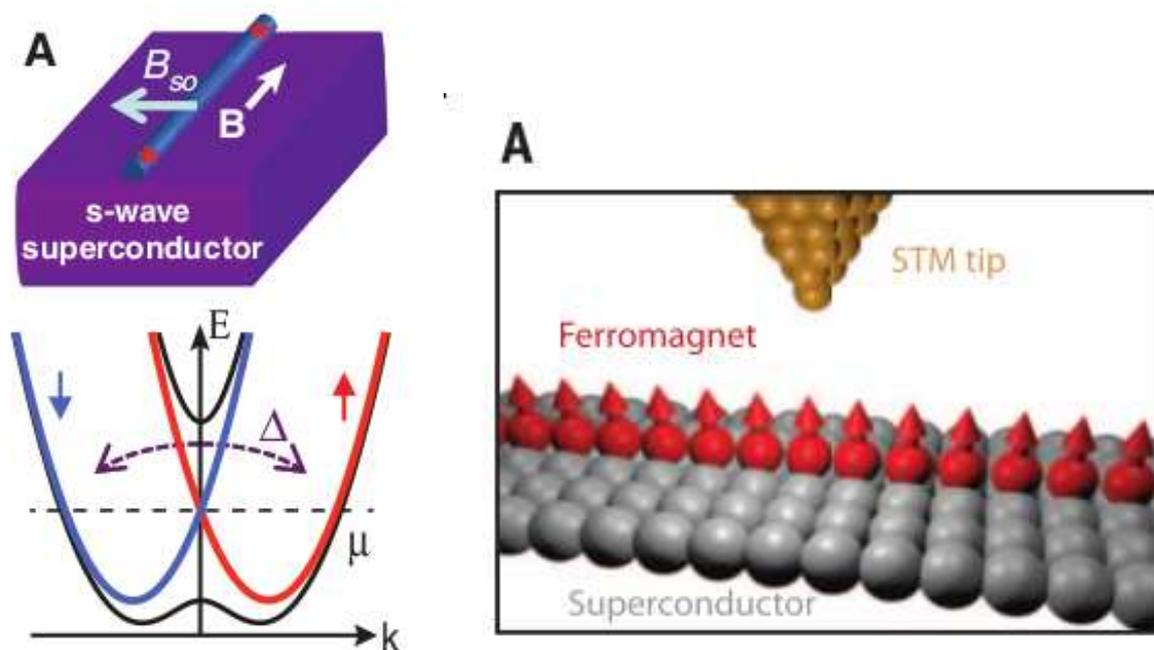


图 7-2: 左图: 具有强自旋轨道耦合的半导体一维纳米线放在 s 波超导体上面, 并在纳米线上施加一个外加磁场, 该磁场与自旋轨道耦合有效磁场垂直。摘自文献 [295]。右图: 一维铁磁原子链放在具有强自旋轨道耦合的 s 波超导体表面。摘自文献 [305]。

在人造拓扑超导体中, 除了上述常见的有效 p 波超导体外, 还有一类是通过量子反常霍尔绝缘体跟传统的 s 波超导体近邻耦合来实现 [312,313] (参见章节 7.4)。Zhang 小组研究的量子反常霍尔绝缘体是在拓扑绝缘体中进行磁性掺杂得到的, 该体系在边界上有 C_1 个手征态 (称之为量子反常霍尔态), C_1 是体系的 Chern 数。研究发现当量子反常霍尔态与传统 s 波超导体接触时就会表现出拓扑超导体的行为, 产

生 $2C_1$ 个 Majorana 费米子。该方案还可以推广到量子霍尔系统中。有关这类拓扑超导体跟有效 p 波超导体的比较会在章节 7.4 和第 8 章中详细讨论。

表 7-1: 单体哈密顿量按照是否具有时间反演对称性，粒子-空穴对称性以及手征对称性分成十个拓扑类。0 表示对称性破缺， ± 1 表示体系具有某种对称性，对时间反演对称性而言，自旋为整数（半整数）对应 $+1$ (-1)，对粒子-空穴对称性而言，体系具有（没有）SU(2) 旋转对称性对应 -1 ($+1$)。Z（整数拓扑不变量）和 Z_2 （奇偶两类）为拓扑不变量。 d 是体系的维度，这里给出了低维 ($d = 0, 1, 2, 3$) 的情况。摘自文献 [314]。

	TRS	PHS	SLS	$d = 0$	$d = 1$	$d = 2$	$d = 3$
A	0	0	0	Z	-	Z	-
AI	+1	0	0	Z	-	-	-
AII	-1	0	0	Z	-	Z_2	Z_2
AIII	0	0	1	-	Z	-	Z
BDI	+1	+1	1	Z_2	Z	-	-
CII	-1	-1	1	-	Z	-	Z_2
D	0	+1	0	Z_2	Z_2	Z	-
C	0	-1	0	-	-	Z	-
DIII	-1	+1	1	-	Z_2	Z_2	Z
CI	+1	-1	1	-	-	-	Z

7.2 拓扑分类和拓扑不变量

在上个章节中讨论的所有人造拓扑超导体包括有效 p 波超导体以及基于量子反常霍尔绝缘体的拓扑超导体都可以按照体系是否具有时间反演对称性（TRS），粒子-空穴对称性（PHS）以及手征对称性（SLS）来进行拓扑分类 [314]，参见表 7-1。表中的数字跟对称性有关，0 表示对称性破缺， ± 1 表示体系具有某种对称性。具体来说，三个对称性操作可以分成两类，

$$C : H = \epsilon_c C H^T C^{-1}, CC^\dagger = 1, C^T = \eta_c C, \quad (7.1)$$

$$P : H = -P H P^{-1}, PP^\dagger = 1, P^2 = 1, \quad (7.2)$$

其中 H 表示单体哈密顿量， $\epsilon_c = \pm 1$ ， $\eta_c = \pm 1$ 。当 $\epsilon_c = 1$ 的时候， C 代表 TRS 操作，其中 $\eta_c = \pm 1$ 分别对应整数和半整数自旋的粒子；当 $\epsilon_c = -1$ 的时候， C 代表 PHS 操作，其中 $\eta_c = \pm 1$ 分别对应三态和单态配对的哈密顿量。需要指出的是 η_c 即为表中 TRS 和 PHS 的取值。 P 表示的是 SLS 操作，当该对称性操作存在的时候表中相应的取值为 1。从表中可以看出，每一个拓扑分类在各个维度下都有一个对应的拓扑不变量，可以是 Z （整数拓扑不变量）或者 Z_2 （奇偶两类）。需要指出的是每个超导体都有粒子-空穴对称性，因此在接下来的讨论中不再特别说明。我们先来看一下零维拓扑

超导体中的情况，研究集中在拓扑分类 D，该分类具有 Z_2 的拓扑不变量。一个自由费米子哈密顿量可以一般性地写成以下形式 [315]

$$H_A = \frac{i}{4} \sum_{j,k} A_{jk} c_j c_k, \quad (7.3)$$

其中 A 是一个实的反对称矩阵，维度为 $2n$ ，表示体系中离散能级的数目； c_i 代表 Majorana 算符，满足 $c_i^\dagger = c_i$ 。任何偶数维的实的反对称矩阵可以分解成 [316]

$$A = O \begin{pmatrix} 0 & E_1 & & & & \\ -E_1 & 0 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \emptyset & & \\ & & & & 0 & E_M \\ & & & & -E_M & 0 \end{pmatrix} O^T, \quad (7.4)$$

O 表示一个实的正交矩阵， $\pm E_n$ ($E_n \geq 0$) 是 A 的本征值。体系的拓扑不变量 \mathcal{P} 可以用 A 的 Pfaffian $\text{Pf } A$ 来表征 [317],

$$\mathcal{P} \equiv \text{sgn}(\text{Pf } A) = \text{Det } O = \pm 1, \quad (7.5)$$

sgn 表示符号函数， $\mathcal{P} = +1$ 对应拓扑平凡，而 $\mathcal{P} = -1$ 对应拓扑非平凡。另外需要说明的是当 A 有零能本征值的时候 \mathcal{P} 无法定义，此时对应的是拓扑边界。

一维拓扑超导体的研究集中在拓扑分类 D, BDI 以及 DIII。这三个拓扑分类中 $SU(2)$ 旋转对称性都被破坏，但可以用是否具有时间反演对称性对它们进行区分。拓扑分类 D 中时间反演对称破缺，DIII 具有真实的时间反演对称（体系哈密顿量中不包含磁场项），而 BDI 中存在有效的时间反演对称（体系哈密顿量虽然包含磁场项但它是纯实的，可以具有类似玻色子的时间反演对称性）。这里需要指出的是在实际体系中拓扑分类 BDI 中的有效时间反演对称性很容易被破坏，此时体系会变成拓扑分类 D，有关拓扑分类在 BDI 和 D 之间变化对体系拓扑性的影响会在章节 7.3.3 中详细讨论。接下来看一下这些拓扑分类所对应的拓扑不变量以及如何计算这些拓扑不变量。拓扑分类 BDI 具有 Z 的拓扑不变量，是用 Winding 数 N 来表征的。BDI 中由于有效时间反演对称和粒子-空穴对称同时存在，体系还具有手征对称性，此时哈密顿量可以么正变换成一个只有非对角块的形式

$$H_k = \begin{pmatrix} 0 & A_k \\ A_k^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.6)$$

Winding 数 [318]

$$N = \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{BZ}} \frac{1}{z} dz \quad z = \frac{\det A_k}{|\det A_k|}. \quad (7.7)$$

拓扑分类 D 和 DIII 具有 Z_2 的拓扑不变量，简单地说可以通过对 Winding 数进行奇偶分类得到，奇数对应拓扑非平凡，偶数对应拓扑平凡，具体的会在章节 7.3.3 和 7.3.5 中讨论。这两个分类中的 Z_2 略有不同，D 中体系一端只有一个 Majorana 费米子而 DIII 中一端有一对时间反演对称保护的 Majorana 费米子（参见章节 7.3.5）。

对于二维拓扑超导体而言，研究集中在拓扑分类 D，该分类中时间反演对称和 SU(2) 旋转对称破缺，具有 Z 的拓扑不变量，是用 Chern 数 C_1 来表征的。

$$C_1 = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} d^2\mathbf{k} f_{xy}(\mathbf{k}), \quad (7.8)$$

其中 Berry 曲率 f_{xy} 为

$$f_{xy}(\mathbf{k}) = i \sum_{m,n} (f_m - f_n) u_m^\dagger(\mathbf{k}) [\partial_{k_x} H(\mathbf{k})] u_n(\mathbf{k}) \\ \times u_n^\dagger(\mathbf{k}) [\partial_{k_y} H(\mathbf{k})] u_m(\mathbf{k}) / [E_m(\mathbf{k}) - E_n(\mathbf{k})]^2. \quad (7.9)$$

$u_m(\mathbf{k})$ 表示哈密顿量 $H(\mathbf{k})$ 的第 m 个本征态，相对应的本征值为 $E_m(\mathbf{k})$ 。对占据带（空带）而言， $f_m = 1$ (0)。这里的拓扑分类 D 具有 Z 的拓扑不变量，与一维拓扑超导体中拓扑分类 D 具有 Z_2 不同，这反映了体系维度对拓扑性的影响。

7.3 有效 p 波超导体

7.3.1 无自旋手征 p 波超导体模型

接下来我们先详细地讨论人造拓扑超导体中最受关注的有效 p 波超导体。在讨论有效 p 波超导体之前，我们从最简单基本的无自旋手征 p 波超导体模型入手。在后面的讨论中我们会指出有效 p 波超导体在一些近似下可以变成无自旋 p 波超导体，两者是拓扑等价的。下面我们以一维无自旋手征 p 波超导体为例来研究 Majorana 费米子存在的条件。一维无自旋 p 波超导体的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2} \int dx \begin{pmatrix} \psi^\dagger(x) & \psi(x) \end{pmatrix} H_{\text{BdG}}(x) \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi^\dagger(x) \end{pmatrix}, \quad (7.10)$$

其中 Bogoliubov-de Gennes [319] (BdG) 哈密顿量 $H_{\text{BdG}}(x)$ 可写成

$$H_{\text{BdG}}(x) = \begin{pmatrix} \frac{k_x^2}{2m^*} - \mu & \Delta k_x \\ \Delta k_x & -\frac{k_x^2}{2m^*} + \mu \end{pmatrix}. \quad (7.11)$$

$k_x = -i\partial_x$, m^* 为有效质量, μ 是体系的化学势, Δ 表示平均场下超导配对势的强度。

之前我们讲过在超导体中 Majorana 费米子与零能元激发是一一对应的。因此我们只需求解 BdG 哈密顿量的零能本征态即可, 也就是求解本征方程 $H_{\text{BdG}}(x)\Psi_\alpha(x) = 0$ 。简单计算后可知, 零能本征态波函数具有以下形式

$$\Psi_\alpha(x) = e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha i \end{pmatrix}, \quad (7.12)$$

其中 $\alpha = \pm 1$, k_x 满足方程 $\frac{k_x^2}{2m^*} - \mu + \alpha i \Delta k_x = 0$ 。由于 Majorana 费米子局域在边界处, k_x 的虚部肯定不能为零。但若 k_x 为纯虚数则波函数趋于边界的时候会发散无法满足边界条件 (边界条件要求波函数在边界处严格为零), 因此 k_x 实部也必须非零。不妨设 $k_x = k_1 + ik_2$, 代入上面方程可得

$$\frac{k_1^2 - k_2^2}{2m^*} - \mu - \alpha \Delta k_2 = 0, \quad (7.13)$$

$$\frac{k_1 k_2}{m^*} + \alpha \Delta k_1 = 0. \quad (7.14)$$

由方程 (7.14) 可知, $\frac{k_2}{m^*} + \alpha \Delta = 0$ 。将这个关系代入方程 (7.13) 可得, $\frac{k_1^2}{2m^*} = \mu - \frac{1}{2}m^*\Delta^2$ 。很明显, 存在 Majorana 费米子的条件是 $\mu > \frac{1}{2}m^*\Delta^2$ 。特别地, 在弱超导配对极限下 ($|\Delta| \ll |\mu|$), Majorana 费米子出现的条件可近似为 $\mu > 0$ 。需要指出的是 Majorana 费米子波函数的具体形式可以通过严格求解 BdG 方程 $H_{\text{BdG}}(x)\Psi_\alpha(x) = 0$ 得到, 但不是我们这里关心的问题。

上面我们从 Majorana 费米子波函数出发讨论了 Majorana 费米子存在的条件。其实还可以利用体系的拓扑性质来判断 [276], 简单地说就是在弱超导配对极限下通过数费米面的数目给出 Majorana 费米子存在的必要条件。首先确定体系能隙闭合的条件, 容易得知为 $\mu = 0$, 这很自然地把体系分成了 $\mu > 0$ 跟 $\mu < 0$ 两部分。其中 $\mu > 0$ ($\mu < 0$) 对应的费米面数目为奇数 (偶数), 这就决定了 $\mu > 0$ 是拓扑非平凡区域 (此时一维无自旋手征 p 波超导体是拓扑超导体), 即 Majorana 费米子出现的参数范围。这里从拓扑角度得到的条件跟前面是一致的。以上我们从零能本征态波函数以及拓扑性质两个角度分别讨论了一维无自旋手征 p 波超导体中 Majorana 费米子存在的条件或者说 p 波超导体是拓扑超导体的条件。这些方法可以一般性地推广到二维无自旋手征 p 波超导体中去, 这里不再讨论。

上述的讨论考虑的是无自旋的简单模型，而在实际体系中需要考虑自旋自由度。理论上预言 Sr_2RuO_4 是带自旋的手征 p 波超导体 [284, 285]，但是实验上到现在还没有定论。这方面实验进展缓慢使得本征拓扑超导体是否存在成为一个悬而未决的问题。要从这个方向去寻找 Majorana 费米子很难有所突破。

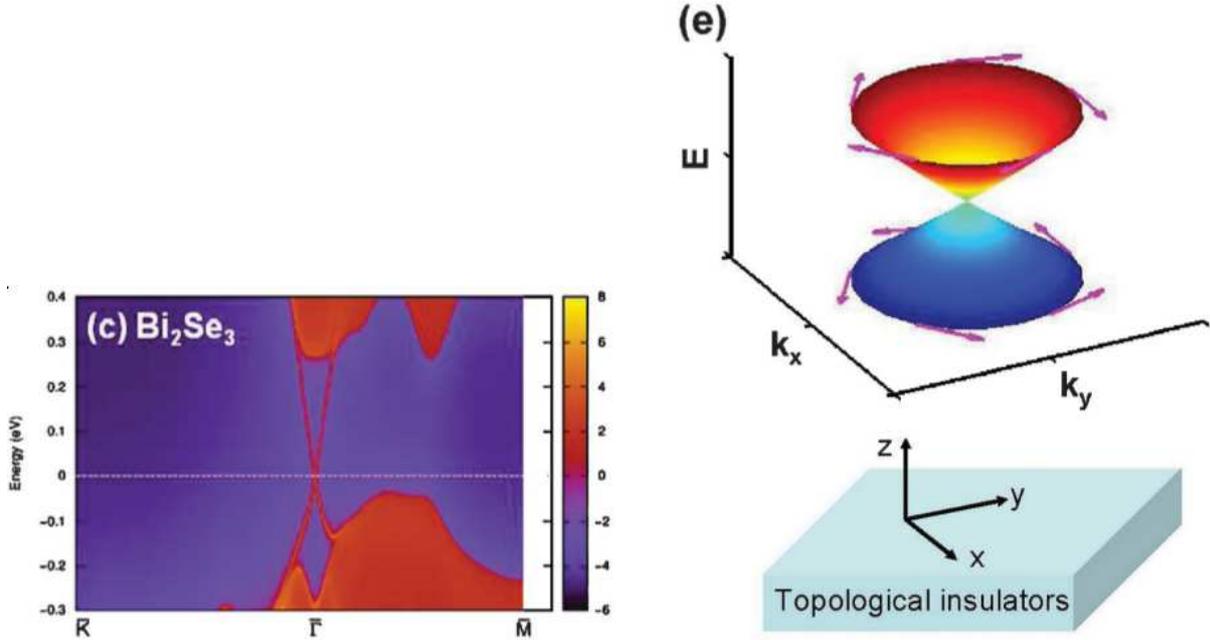


图 7-3: 左图: 三维强拓扑绝缘体的能带, 其中能隙中的线性谱是二维表面态。右图: 二维表面态 (上表面) 的自旋极化示意图。摘自文献 [280]。

7.3.2 拓扑绝缘体

2008 年, Fu 和 Kane 打破了原先直接寻找本征拓扑超导体的框架, 提出了一个全新的想法, 即用人工合成的方法造出新的拓扑超导体 [288]。该拓扑超导体与无自旋 p 波超导体是拓扑等价的, 现在一般被称为有效 p 波超导体。这个里程碑式的工作给 Majorana 费米子的研究开辟了新的方向, 在这之后拓扑超导体跟 Majorana 费米子受到了极大的关注。

接下来我们具体介绍一下这方面的工作。以最简单的三维强拓扑绝缘体为例, 其表面态是一个二维无质量的 Dirac 费米子 (参见图 7-3), 可以用一个时间反演对称的哈密顿量来描述 [288],

$$H_0 = \int dx \left(\psi_{\uparrow}^{\dagger}(x), \psi_{\downarrow}^{\dagger}(x) \right) (v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mu) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(x) \\ \psi_{\downarrow}(x) \end{pmatrix}. \quad (7.15)$$

这里 v_F 是费米速度, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ 是自旋空间的泡利矩阵, μ 是体系的化学势。

将上述二维表面态放在一个传统的 s 波超导体上面，超导配对就会通过近邻效应进入表面态。该近邻效应引入的超导配对哈密顿量可以描述为

$$H_{\text{SC}} = \int dx \Delta \psi_{\uparrow}(x) \psi_{\downarrow}(x) + H.c., \quad (7.16)$$

其中 $\Delta = \Delta_0 e^{i\phi}$ ， Δ_0 表示超导配对势的强度， ϕ 是超导配对的相位。此时总的哈密顿量为 $H_{\text{total}} = H_0 + H_{\text{SC}}$ 。特别地，在弱的超导配对极限下（超导配对势强度远小于体系的化学势），只需要考虑费米面附近的一个能带即可，通过简单推导可知该带内的有效哈密顿量具有以下形式 [288]，

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ (v_{\text{F}} |\mathbf{k}| - \mu) \psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}) + [\Delta / |\mathbf{k}| (k_x + ik_y) \psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \psi^{\dagger}(-\mathbf{k}) + H.c.] \right\}, \quad (7.17)$$

很明显这跟无自旋手征 $p_x + ip_y$ 超导体在形式上是等价的（两者有一个区别，这里研究的系统是具有时间反演对称的而无自旋手征 $p_x + ip_y$ 超导体中没有）。根据之前的讨论（参见章节 7.3.1），拓扑绝缘体表面态在传统 s 波超导体的近邻影响下可以变成拓扑超导体，在边界或者量子涡旋处会有 Majorana 费米子。这是第一个人造拓扑超导体，有效 p 波超导体。在这之后，人们将传统 s 波超导体通过近邻效应引入了大量的系统提出了很多方案，使得拓扑超导体跟 Majorana 费米子的研究变得非常热门。

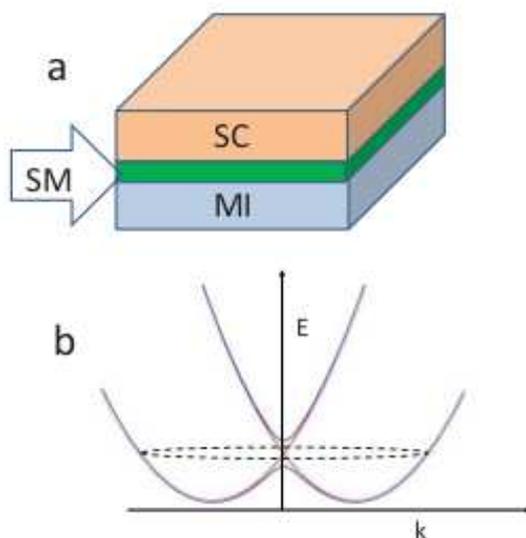


图 7-4: (a) 具有强自旋轨道耦合的二维半导体薄膜放在传统 s 波超导体跟铁磁绝缘体之间。(b) 半导体薄膜自身的能带结构。没有交换场的时候两个自旋轨道耦合劈开的能带在动量为零的地方接在一起，系统始终有两个费米面；在有交换场作用的时候，能带会在零动量的地方打开一个带隙，这样化学势在带隙中的时候系统只有一个费米面。摘自文献 [289]。

7.3.3 半导体纳米线

在 Fu 和 Kane 提出拓扑绝缘体表面态受超导近邻影响可以有 Majorana 费米子后 [288], Das Sarma 小组提出了一个更简单的模型如图 7-4 (a) 所示, 他们先用常见的具有强自旋轨道耦合的二维半导体薄膜替代拓扑绝缘体, 再通过近邻效应从磁性绝缘体中引入交换场 [287]。交换场的作用使得半导体二维电子气的能带在动量为零的地方打开一个能隙如图 7-4 (b) 所示, 这样当体系的化学势处于能隙中的时候, 只有一个费米面被占据, 这跟强拓扑绝缘体二维表面态的情况类似 (关于奇数个费米面的要求会在本小节后面讲半导体纳米线的时候详细讨论)。他们通过计算发现, 当 $V_z^2 > \mu^2 + \Delta^2$, 在量子涡旋处会有一个零能的 Majorana 费米子, 其中 V_z , μ , Δ 分别表示交换场引起的塞曼劈裂, 化学势, 近邻效应引起的超导配对势强度。

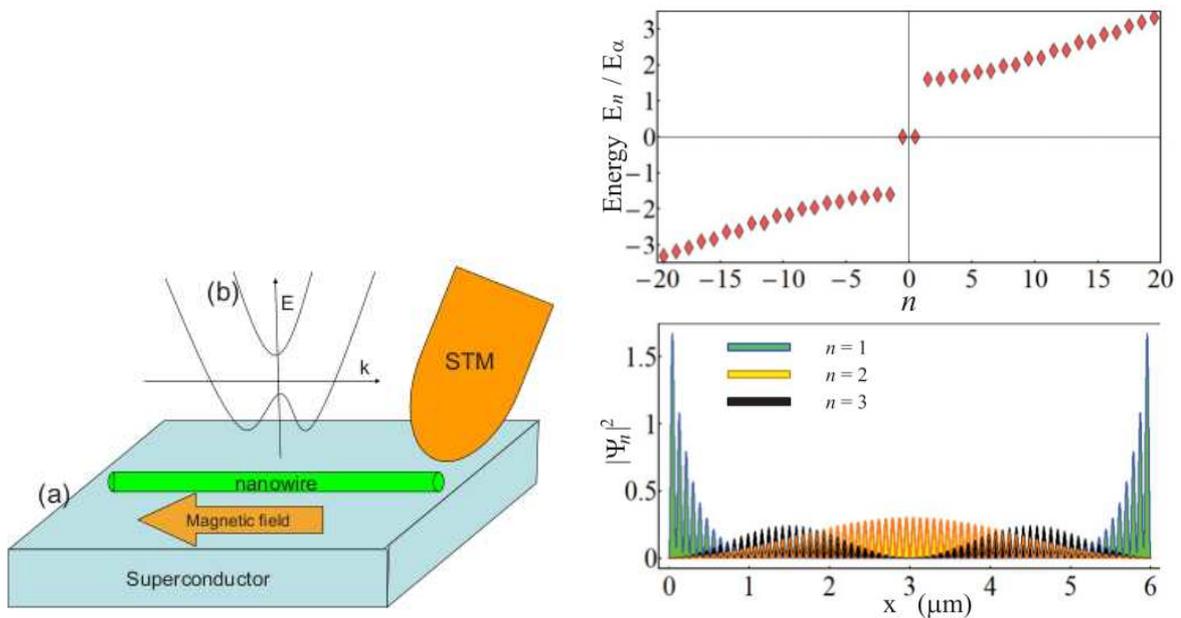


图 7-5: 左图: 在 s 波超导体上面放一根半导体一维纳米线, 同时施加一个平面内的外加磁场用于在纳米线中引入塞曼劈裂。体系的化学势可以通过外部的门电压来调控, 这里没有在图中展示出来。摘自文献 [289]。右图: 在拓扑非平凡区域, 数值对角化有限长纳米线对应的 BdG 哈密顿量得到本征值 (上半部分) 及本征波函数的实空间几率分布 (下半部分), 其中零能本征态 ($n = \pm 1$) 对应的是 Majorana 费米子。摘自文献 [320]。

之后, Das Sarma 小组发现 Majorana 费米子可以出现在更简单的半导体一维纳米线的两端 [289]。具体模型是先将具有强自旋轨道耦合的半导体一维纳米线放在 s 波超导体上面, 再施加一个平面内的磁场用于在纳米线中引入塞曼劈裂, 类似于上面铁磁绝缘体的作用 (参见图 7-5)。此时磁场的方向强烈地依赖于纳米线中自旋轨道耦合有效场的方向。比如对于 Rashba 自旋轨道耦合而言 [44], 自旋轨道耦合有效场垂直于线的方向, 因此外加磁场方向要与线平行。对于其它的自旋轨道形式可以做类似的分析。在这一小节中我们重点讨论半导体一维纳米线中的 Majorana 费米子。

一维半导体纳米线的哈密顿量为

$$H_{\text{NW}} = \frac{1}{2} \int dx \Psi^\dagger(x) H_{\text{BdG}}(x) \Psi(x), \quad (7.18)$$

$$\Psi^\dagger(x) = \left(\psi_\uparrow^\dagger(x), \psi_\downarrow^\dagger(x), \psi_\downarrow(x), -\psi_\uparrow(x) \right), \quad (7.19)$$

$$H_{\text{BdG}}(x) = \begin{pmatrix} H_e(k_x) - \mu & \Delta \\ \Delta & \mu - \sigma_y H_e^*(-k_x) \sigma_y \end{pmatrix}, \quad (7.20)$$

$$H_e(k_x) = \frac{k_x^2}{2m^*} + \alpha_R k_x \sigma_y + V_Z \sigma_x. \quad (7.21)$$

这里， α_R 表示 Rashba 自旋轨道耦合的强度。通过简单计算可知 H_e 的本征值以及相应的本征态为

$$\varepsilon_{k_x\beta} = \frac{k_x^2}{2m^*} + \beta \sqrt{V_Z^2 + \alpha_R^2 k_x^2}, \quad (7.22)$$

$$\psi_{k_x\beta}(x) = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \beta \frac{V_Z - i\alpha_R k_x}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha_R^2 k_x^2}} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (7.23)$$

其中 $\beta = \pm 1$ 。在 H_e 的本征态下，我们可以重新写出 BdG 哈密顿量的形式（等价于做了一个么正变换）

$$H_{\text{BdG}}^{\text{new}}(k_x) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{k_x+} - \mu & 0 & \frac{V_Z \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha_R^2 k_x^2}} & \frac{-i\alpha_R k_x \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha_R^2 k_x^2}} \\ 0 & \varepsilon_{k_x-} - \mu & \frac{-i\alpha_R k_x \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha_R^2 k_x^2}} & \frac{V_Z \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha_R^2 k_x^2}} \\ \frac{V_Z \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha_R^2 k_x^2}} & \frac{i\alpha_R k_x \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha_R^2 k_x^2}} & \mu - \varepsilon_{k_x-} & 0 \\ \frac{i\alpha_R k_x \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha_R^2 k_x^2}} & \frac{V_Z \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha_R^2 k_x^2}} & 0 & \mu - \varepsilon_{k_x+} \end{pmatrix}. \quad (7.24)$$

在弱超导配对极限下，当化学势处于外加磁场在零动量处引起的能隙内时（ $|\mu| < |V_z|$ ），只有一个费米面被占据（对应 $\beta = -1$ ）。此时有效的超导配对是动量的奇函数，半导体一维纳米线与无自旋 p 波超导体拓扑等价，是拓扑超导体。

上述这种在弱超导配对近似下将体系的哈密顿量约化等价于无自旋 p 波超导体的分析方法只能给出 Majorana 费米子存在的必要条件，要想得到充要条件必须从拓扑不变量的角度出发。在研究体系的拓扑性质之前，我们先要确定 BdG 哈密顿量 H_{BdG} 的能隙闭合条件，这是因为能隙闭合决定了拓扑相的边界。很明显， H_{BdG} 在动量为零的时候能隙闭合因为动量为零的时候自旋轨道耦合消失，闭合条件为 $V_z^2 = \mu^2 + \Delta^2$ 。该条件很自然地把系统分成了两个拓扑区域， $V_z^2 > \mu^2 + \Delta^2$ 以及 $V_z^2 < \mu^2 + \Delta^2$ 。这些拓扑区域对应的拓扑不变量取决于体系的对称性。具体来看，一维 BdG 哈密顿量 H_{BdG} 破坏了时间反演对称性，但是由于体系的哈密顿量是纯实的，满足有效的时间反演对称性（具有类似波色子的时间反演对称性）。另外， H_{BdG} 破坏了 SU(2) 旋转对称性但具有

粒子-空穴对称性。有效的时间反演对称跟粒子-空穴对称性一起会导致手征对称性。这些对称性决定了系统属于拓扑分类 BDI，具有整数的拓扑不变量，用 Winding 数 N 来描述 [314]。由于体系具体手征对称性，BdG 哈密顿量 H_{BdG} 可以么正变换成一个只有非对角块的形式

$$\tilde{H}_{\text{BdG}} = \begin{pmatrix} 0 & A_k \\ A_k^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.25)$$

$$A_k = \begin{pmatrix} \frac{k_x^2}{2m^*} - \mu & -i\alpha_R k_x + V_z + \Delta \\ i\alpha_R k_x + V_z - \Delta & \frac{k_x^2}{2m^*} - \mu \end{pmatrix}. \quad (7.26)$$

根据章节 7.2 中公式 (7.7) 可计算得 Winding 数 N ，其中

$$\det A_k = \left(\frac{1 - \cos k_x}{m^*} - \mu \right)^2 - V_z^2 + \Delta^2 - \alpha_R^2 \sin^2 k_x - 2i\alpha_R \sin k_x \Delta. \quad (7.27)$$

由于计算 Winding 数需要对整个布里渊区进行积分，公式 (7.26) 中 k_x^2 和 k_x 必须分别替换成 $2(1 - \cos k_x)$ 和 $\sin k_x$ 。我们先确定 $N \neq 0$ 和 $N = 0$ 的边界条件，即拓扑条件，这可以很简单地从 $\det A_k$ 与实轴的两个交点来看，两个交点若同号则有 $N = 0$ ，若异号则有 $N \neq 0$ 。具体地，实轴两个点对应动量 $k_x = 0$ 和 $k_x = \pm\pi$ ($k_x = \pm\pi$ 是等价的)，对应的 $\det A_k$ 分别为 $\mu^2 + \Delta^2 - V_z^2$ 和 $(\frac{2}{m^*} - \mu)^2 + \Delta^2 - V_z^2$ 。考虑到 $|\mu|, |\Delta|, |V_z| \ll \frac{1}{m^*}$ ，则有 $(\frac{2}{m^*} - \mu)^2 + \Delta^2 - V_z^2 > 0$ 。因此， $\mu^2 + \Delta^2 - V_z^2 > 0$ 对应 $N = 0$ ，拓扑平凡，而 $\mu^2 + \Delta^2 - V_z^2 < 0$ 对应 $N \neq 0$ ，拓扑非平凡，这跟前面用能隙闭合得到的拓扑边界条件是一致的。进一步，在拓扑非平凡区，通过简单计算后发现， $N = 1$ ($\alpha_R \Delta > 0$) 或者 $N = -1$ ($\alpha_R \Delta < 0$)，在一维纳米线端点会有一个 Majorana 费米子出现 [300]。需要指出的是 Majorana 费米子的数目是需要严格计算拓扑不变量才能得到，但要是仅仅为了判断各个区域的拓扑性则不需要这么麻烦。就拓扑区域 $V_z^2 < \mu^2 + \Delta^2$ 而言，可以取其中的代表点 $V_z = 0 < \mu^2 + \Delta^2$ 来看，很明显没有外加磁场的时候体系是拓扑平凡的。另外，两个拓扑区域 $V_z^2 > \mu^2 + \Delta^2$ 以及 $V_z^2 < \mu^2 + \Delta^2$ 是不可能连续地变化到彼此的，这就意味着区域 $V_z^2 > \mu^2 + \Delta^2$ 是拓扑非平凡的。这种选取拓扑区域中代表点的方法能够很快地对拓扑性进行判断。

我们刚刚从有效 p 波超导体和拓扑不变量两个方面得到了一维纳米线中 Majorana 费米子存在的条件。接下来具体看一下 Majorana 费米子实空间几率分布。通过数值对角化有限长的 BdG 哈密顿量可得体系的本征值及本征态，如图 7-5 右图所示。右图的上半部分表示的是本征值，其中有两个零能 ($n = \pm 1$)，是一对 Majorana 费米子，出现在体系的两端。下半部分给出了不同能级本征波函数的实空间几率分布，Majorana 费米子 ($n = 1$) 很好地局域在纳米线的两端，而有限能量的波函数在整个纳米线中是扩展的。这里需要指出的是如果纳米线不够长，两端的 Majorana 费米子波函数就会有交叠，从而引起能量劈裂，会掩盖 Majorana 费米子存在的真相。

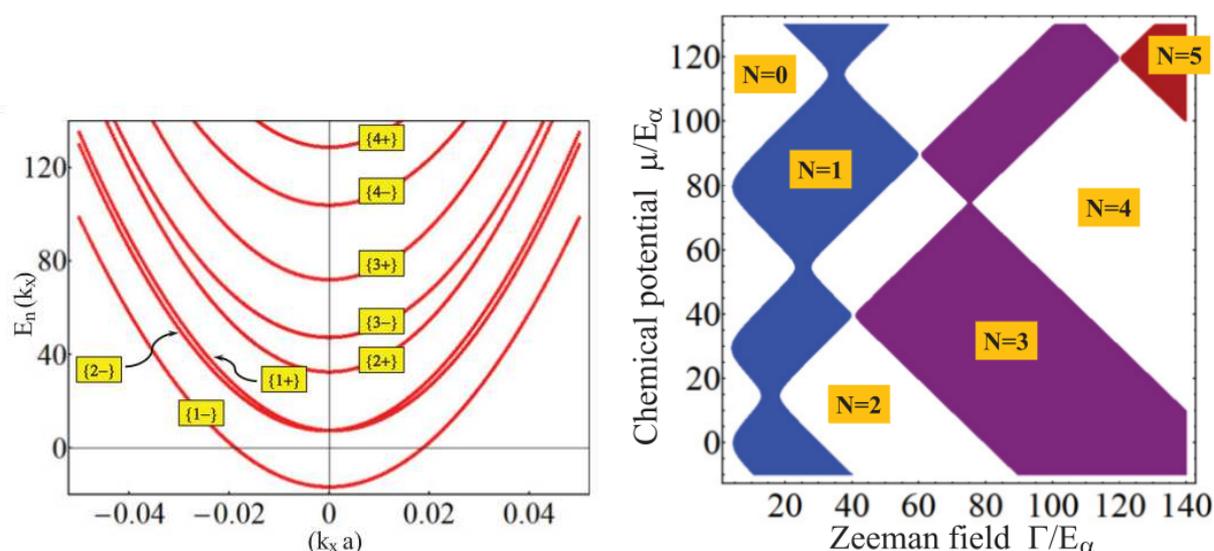


图 7-6: 左图: 在没有超导配对时有限宽半导体纳米线的能谱。数字表示的是不同的子带, \pm 对应子带被劈裂成的两个自旋带, 这是由塞曼劈裂导致的。通过调节化学势可以占据不同的子带, 费米面数目也会相应改变。右图: 多带纳米线随塞曼劈裂以及化学势变化的拓扑相图。数字表示体系中 Majorana 费米子的数目。摘自文献 [320]。

前面讲到严格一维半导体纳米线的 BdG 哈密顿量 H_{BdG} 属于拓扑分类 BDI, 具有整数的拓扑不变量, 这是由系统具有手征对称性决定的。实际上, H_{BdG} 中的手征对称性很容易被破坏, 比如再加入一个弱的 y 方向磁场 $V_y \sigma_y$, 或者另一个方向弱的自旋轨道耦合比如 $\alpha_{\text{add}} k_y \sigma_x$, 这是因为这些额外项使得哈密顿量不再纯实从而破坏了系统的有效时间反演对称性, 相应的手征对称性也不存在了 [300]。此时, H_{BdG} 属于拓扑分类 D, 具有 Z_2 的拓扑不变量。简单地说, 原先的整数拓扑不变量将被分成两类, 偶数个 Majorana 费米子由于相互作用会全部消失对应拓扑平凡, 而奇数个 Majorana 费米子还会剩下一个受拓扑保护的, 对应拓扑非平凡, 这就是前面提到的奇数个费米面要求的来源。前面的严格一维纳米线模型中由于最多只有一个 Majorana 费米子, 所以拓扑性并没有改变。接下来我们将上面严格一维纳米线拓展到有限宽, 此时会有多个子带进来如图 7-6 左图所示, 可能会有多个 Majorana 费米子存在, 我们就可以讨论拓扑不变量的变化 (从 Z 到 Z_2) 对系统 Majorana 费米子数目的影响 [320]。这里我们以在另一个方向加入弱的自旋轨道耦合 $\alpha_{\text{add}} k_y \sigma_x$ (子带间自旋轨道耦合) 为例进行讨论。在没有子带间自旋轨道耦合的时候, 各个子带间彼此独立, 此时每个子带 (包含两个自旋带) 都可以看成前面讲的严格一维纳米线, 属于拓扑分类 BDI, 具有整数的拓扑不变量。体系总的 Majorana 费米子的数目等于每个子带的数目相加如图 7-6 右图所示, 数字代表 Winding 数, 即 Majorana 费米子数目, 每个数字代表区域的边界是由能隙闭合条件决定的。当磁场较小时, 体系中只有一个 Majorana 费米子, 随着磁场的增大, 体系中 Majorana 费米子越来越多。当我们考虑进带间自旋轨道耦合 $\alpha_{\text{add}} k_y \sigma_x$ 后, 子带间不再独立需要整体考虑, 更重要的是体系的对称性降低了 (手征对称性消失), 拓

拓扑分类从原来的 BDI 变为 D，相应的拓扑不变量从 Z 变到 Z_2 。根据 Z_2 的拓扑分类，原先具有偶数个 Majorana 费米子的拓扑区域变成拓扑平凡，而有奇数个 Majorana 费米子的区域仍然为拓扑非平凡但 Majorana 费米子只剩下一个。其物理原因是这样的，带间自旋轨道耦合可以将相邻的两个子带直接耦合起来，进而所有的子带都被耦合在一起（包括原先各个子带独立的 Majorana 费米子）。耦合在一起的 Majorana 费米子能量一般不再为零，除了奇数个的时候还剩下一个零能的，这是由体系具有粒子-空穴对称性保证的。最后我们总结一下 Z 跟 Z_2 的区别，第一， Z_2 的体系中最多只有一个 Majorana 费米子而 Z 的系统中可以存在多个；第二， Z_2 中拓扑非平凡区域更小且与拓扑平凡区域交错在一起，需要实验上非常精细地调节参数比如化学势磁场等。实际上，在一维拓扑超导体中，体系很难有整数拓扑不变量，因为唯一具有 Z 的拓扑分类 BDI 是由近似的手征对称性保护的 [314]，很容易被破坏。但是在二维拓扑超导体中，情况会有所不同，我们会在后面的小节中详细讨论（参见 7.3.4）。

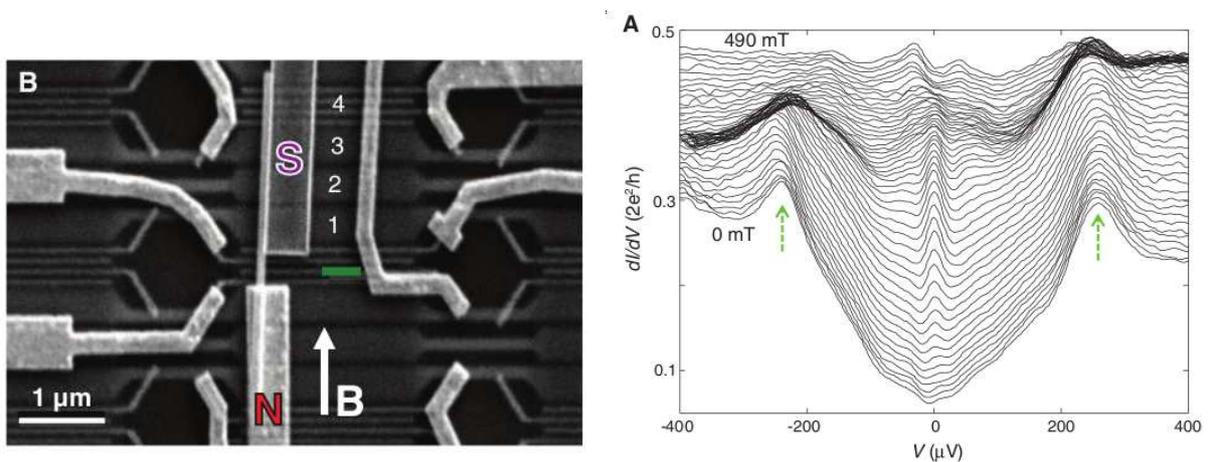


图 7-7: 左图: 实验器件的扫描电子显微镜图像。InSb 纳米线上下端分别与超导 (S) 和普通金属 (N) 接触。整个纳米线上施加了平面内的外加磁场。右图: 不同磁场下微分电导随偏压的变化。摘自文献 [295]。

Das Sarma 小组提出的纳米线模型 [289]很快被 Kouwenhoven 小组在实验上实现了 [295]。实验上选用的是具有强自旋轨道耦合的 InSb 纳米线，上下两端分别与超导 (S) 和普通金属 (N) 接触，如图 7-7 左图所示。整个纳米线上施加了平面内的外加磁场，由于 InSb 材料的 g 因子很大，很小的磁场就能达到拓扑非平凡的要求。如图 7-7 右图所示，当磁场加到 100 到 400 mT 之间的时候，实验上看到了一个零偏压电导峰，这是 Majorana 费米子出现的一个迹象。但是零偏压电导峰也有可能来自近藤效应或者杂质 [321–325]，实验上并没有排除这些可能性。另外零偏压电导峰只有理论值的百分之五左右，也没有进行空间分辨没法确定信号来自于边界态还是扩展态。这些问题都需要实验上进一步探究解决。

7.3.4 铁磁原子构型

上一小节中我们提到半导体纳米线的实验缺乏对零偏压电导峰进行空间分辨的能力，因而无法提供 Majorana 费米子为边界态的证据。最近 Yazdani 小组在实验上成功解决了空间分辨的问题，他们把铁磁原子链长在具有强自旋轨道耦合的超导体表面，这样就可以用扫描隧道显微镜进行空间探测 [305]，具体结构如图 7-2 右图所示。随后一些有关一维铁磁原子链的理论工作开始出现，他们主要从能带结构以及拓扑性等角度展开研究，并试图解释实验 [306–309]。最近的几篇理论工作又把一维铁磁链扩展到二维铁磁格子 [310, 311]。这里需要指出的是虽然铁磁原子方案跟半导体的看起来很不一样，但实际上两者没有本质区别，都是用塞曼劈裂，自旋轨道耦合以及近邻效应引入的超导配对实现拓扑超导体。

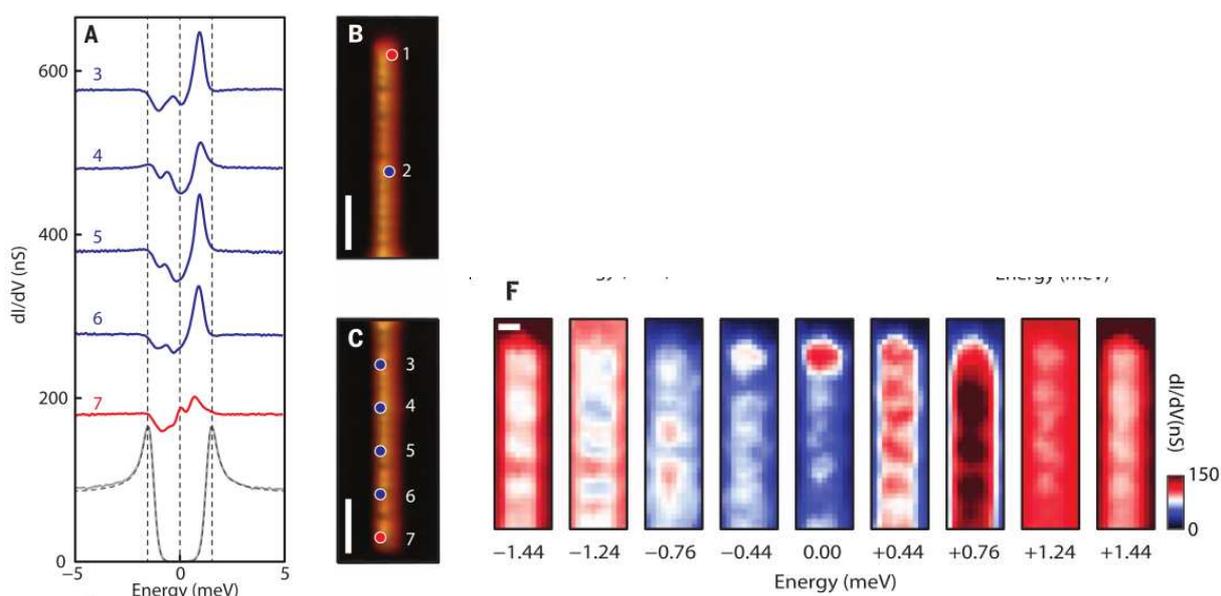


图 7-8: 左图: 不同位置下的微分电导, A 中的数字与 B, C 中是一一对应的。右图: 微分电导的能量以及空间分辨, 只有在零偏压的时候 (中间的插图) 电导在边界处明显增强。摘自文献 [305]。

7.3.4.1 一维铁磁链

我们先来看看一维铁磁链的情况。从图 7-8 左图可以看出，零偏压电导峰只在铁磁原子链的端点处出现，表明体系中存在零能边界态，与理论上预言的 Majorana 费米子一致，这意味着 Majorana 费米子离我们又近了一步。为了看得更清楚，实验上给出了不同能量下电导在铁磁原子链边界附近很长的一段上的位置依赖 (参见图 7-8 右图)，只有在零能的时候电导在边界处明显增强，其它有限能量态都体现了扩展态的行为。为了排除其它因素的影响，实验上用一个很弱的磁场使得铅中的超导性消失，边界处的零偏压电导峰也随之不见，这就排除了杂质以及近藤效应的影响。当然，实验上

还存在不少问题比如实验温度太高跟超导能隙可比拟，铁磁链中多个通道可能会有多个 Majorana 费米子（这些 Majorana 费米子一般会耦合在一起产生能量劈裂）等等，这些有待实验跟理论上进一步研究。

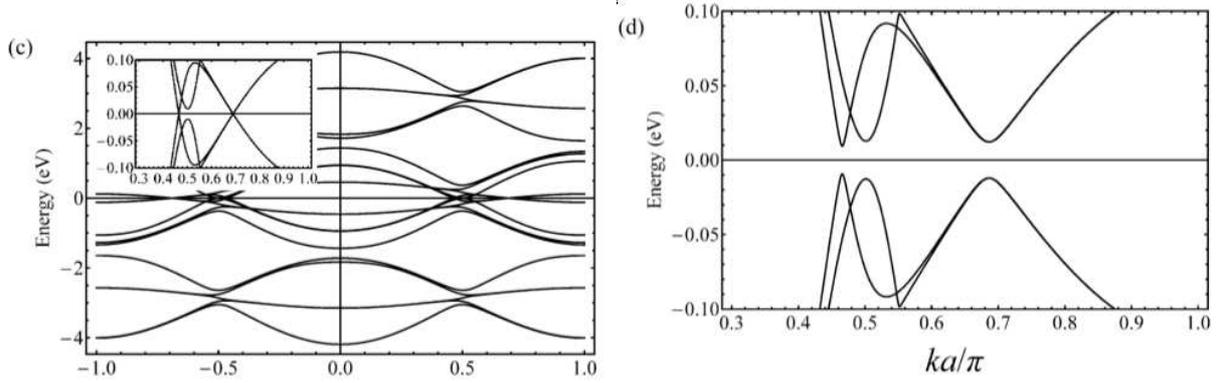


图 7-9: 一维铁磁链的能带结构。左图对应哈密顿量 H_{total} ，右图跟左图相比多了额外的 Rashba 自旋轨道耦合 H_R 的贡献。摘自文献 [306]。

紧跟在实验之后，一些理论工作从能带结构以及拓扑等方面揭示了一维铁磁链系统的性质 [306, 308]。Li 等人从紧束缚模型出发考虑了一维链中 d 电子的最近邻跃迁 (H_t)，交换相互作用 (H_J)，原子自旋轨道耦合 (H_{so}) 以及由近邻引入的 s 波超导配对 (H_{pair}) [306]。具体哈密顿量形式如下

$$H_{\text{total}} = H_t + H_J + H_{\text{so}} + H_{\text{pair}}, \quad (7.28)$$

$$H_t = \sum_{\langle ij \rangle \alpha' \alpha \sigma} t_{\alpha' \alpha} c_{i \alpha' \sigma}^\dagger c_{j \alpha \sigma}, \quad (7.29)$$

$$H_J = -J \hat{m} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (7.30)$$

$$H_{\text{so}} = \lambda_{\text{so}} \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (7.31)$$

$$H_{\text{pair}} = \Delta \sum_{\alpha} \left(c_{\alpha \uparrow}^\dagger c_{\alpha \downarrow}^\dagger + c_{\alpha \downarrow} c_{\alpha \uparrow} \right), \quad (7.32)$$

其中 α 表示 d 电子不同的轨道， $\boldsymbol{\sigma}$ 是自旋空间的泡利矩阵， $t_{\alpha' \alpha}$ ， J ， \hat{m} ， λ_{so} ， \mathbf{L} 以及 Δ 分别为跃迁能，交换劈裂能，磁矩的方向，原子自旋轨道耦合强度，原子角动量以及超导配对势强度。通过数值对角化哈密顿量 H_{total} 可得能带结构如图 7-9 左图所示，有趣的是在费米面处没有打开能隙，此时体系的拓扑是没法定义的。这是因为链中的原子自旋轨道耦合没有引起不同自旋的耦合（没有造成自旋劈裂），本质在于链的结构是空间反演对称的。实际上，在有衬底的时候链的空间反演对称性总是被破坏的，链中的电子轨道会跟超导衬底的轨道杂化导致 Rashba 自旋轨道耦合的出现。该自旋轨道耦合形式为

$$H_R = it_R \sum_{\langle ij \rangle \gamma \tau} c_{i \gamma}^\dagger c_{j \tau} (\hat{d}_{ij} \times \boldsymbol{\sigma}_{\gamma \tau}) \cdot \hat{z}, \quad (7.33)$$

其中 t_R 表示 Rashba 自旋轨道耦合强度, \hat{d}_{ij} 是一个从格点 i 指向格点 j 的单位矢量。在考虑上这一项后, 费米面处打开了能隙如图 7-9 右图所示, 此时体系的拓扑是可以严格定义的。由此可见, 衬底引起的 Rashba 自旋轨道耦合对一维铁磁原子链的拓扑性质起到了至关重要的作用。接下来具体看一下拓扑性, 如图 7-10 左图所示, $M = -1$ 和 $M = 1$ 分别对应拓扑平凡跟拓扑非平凡。随着交换劈裂能变大, 拓扑非平凡区域也相应变大。对于铁原子而言, 交换劈裂能在 2.5 eV 左右, 体系几乎总是拓扑非平凡的。这意味着不需要精细调节参数就能很容易地实现拓扑超导, 跟半导体纳米线相比是个很大的优势。

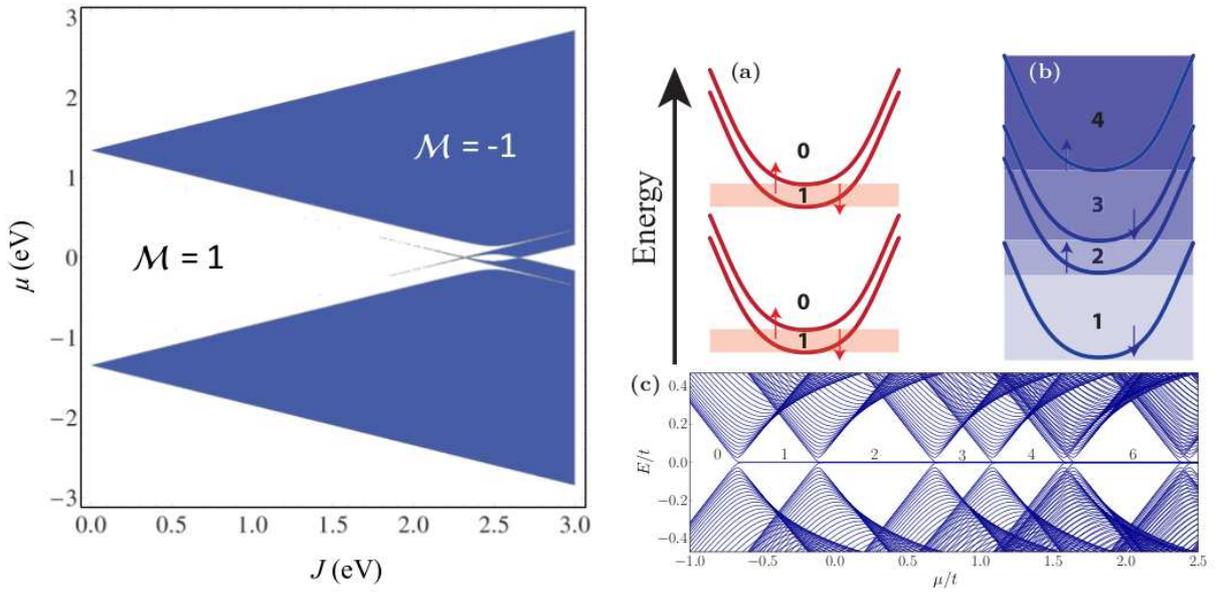


图 7-10: 左图: 一维铁磁链的拓扑相图, 其中 $M = -1$ ($M = 1$) 对应拓扑平凡 (拓扑非平凡)。摘自文献 [306]。右图: (b) 多通道的裸铁磁链能带结构。(c) BdG 哈密顿量的低能元激发能谱随化学势变化。随着化学势增大, 更多的通道被占据, Majorana 费米子的数目也随之增多。摘自文献 [308]。

Das Sarma 小组提出了不同于前面的理论模型 [308]。一维铁磁链哈密顿量可写成 $H = \sum_{k_x} \Psi_{k_x}^\dagger H_{\text{BdG}}(k_x) \Psi_{k_x}$, 其中 $\Psi_{k_x} = (c_{k_x\uparrow}, c_{k_x\downarrow}, c_{-k_x\downarrow}^\dagger, -c_{-k_x\uparrow}^\dagger)$, BdG 哈密顿量 $H_{\text{BdG}}(k_x)$ 表示为

$$H_{\text{BdG}}(k_x) = (-2t \cos k_x - \mu)\tau_z + (\Delta_s + \Delta_p \sin k_x \sigma_y)\tau_x + V_z \sigma_z. \quad (7.34)$$

这里, τ 表示粒子-空穴空间的泡利矩阵, Δ_s 和 Δ_p 分别是超导单态和三态配对势强度, 来源于近邻效应 [307]。在不考虑超导配对影响的时候, 能带结构如图 7-10 右图 (b) 所示, 由于交换场的存在, 不同的自旋带都劈裂开来了, 再加上没有自旋轨道耦合的作用, 各个自旋带之间都是独立的。而超导配对中只需要考虑三态的作用, 因为单态配对被大的交换场压制了, 可以不用考虑。当考虑超导三态配对后, 每个带都可以看

成无自旋 p 波超导体，随着化学势的增加，自旋带逐渐被占据，Majorana 费米子的数目也逐渐增多，如图 7-10 右图 (c) 所示。从拓扑不变量的角度来看，此时体系属于拓扑分类 BDI，具有整数拓扑不变量，是受手征对称性保护的。实际上，手征对称性很容易被破坏，比如交换场还有一个 y 方向的分量，此时体系属于拓扑分类 D，具有 Z_2 拓扑不变量。原先有奇数个 Majorana 费米子的拓扑区域仍然是拓扑非平凡的但只剩下一个 Majorana 费米子，而偶数个 Majorana 费米子的拓扑区域则变成拓扑平凡。关于拓扑不变量从 Z 到 Z_2 的变化对体系的影响在之前已经讲的很清楚了，这里不再赘述。需要指出的是跟之前的理论模型相比，这里没有考虑由超导衬底导致的空间反演不对称而引起的 Rashba 自旋轨道耦合，但在超导配对中多考虑了自旋三态配对。原则上讲这两项都可能存在，彼此之间是压制还是促进关系，究竟哪种机制占主导，这些需要更多的理论研究跟实验支持。

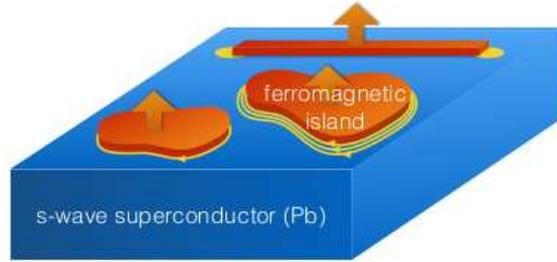


图 7-11: 二维铁磁原子格子置于具有强自旋轨道耦合的 s 波超导体表面实现二维拓扑超导体，Majorana 费米子出现在二维体系的边界处。摘自文献 [311]。

7.3.4.2 二维铁磁格子

上面的一维铁磁原子链模型可以推广到二维铁磁格子中去，即在有强自旋轨道耦合的 s 波超导体表面上放置排成二维格子的铁磁原子 [310, 311] (参见图 7-11)。具体哈密顿量形式为 [311]

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\mathbf{r} \in \Lambda} [t(c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}+\hat{\mathbf{e}}_1} + c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}+\hat{\mathbf{e}}_2}) - \frac{\mu}{2} c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}} + \Delta c_{\mathbf{r},\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{r},\downarrow}^{\dagger} \\
 & + i\alpha(c_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma_2 c_{\mathbf{r}+\hat{\mathbf{e}}_1} - c_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma_1 c_{\mathbf{r}+\hat{\mathbf{e}}_2}) + \text{h.c.}] + J \sum_{\mathbf{r} \in \Lambda^*} c_{\mathbf{r}}^{\dagger} \sigma_3 c_{\mathbf{r}}. \quad (7.35)
 \end{aligned}$$

这里， α 是 Rashba 自旋轨道耦合的强度， Λ 和 Λ^* 分别表示超导体表面层和二维铁磁原子格子。先讨论磁性原子比较紧密的情况，最简单的情况就是 $\Lambda = \Lambda^*$ 。研究拓扑性质之前先确定体系的能隙闭合条件，很显然，在四个反演对称的动量处 $[\mathbf{k}_{ij} = (1-i, 1-j)\pi/2, i, j = \pm]$ 自旋轨道耦合为零体系能隙闭合，相对应的拓扑条件为 $\mu_{i,j,\lambda} = -2(i+j)t + \lambda\sqrt{J^2 - \Delta^2}$ ($i, j, \lambda = \pm$)。考虑到 $2t > \sqrt{J^2 - \Delta^2}$ ，上面的临界化学势按能量从低到高依次为 $\mu_{-,-,-} < \mu_{-,-,+} < \mu_{-+,-} = \mu_{+,-,-} < \mu_{-,+,+} = \mu_{+,-,+} <$

$\mu_{+,+,-} < \mu_{+,+,+}$, 很自然地将系统分成七个拓扑区域。这些拓扑区域是由 Chern 数来区分的, 因为二维铁磁原子格子属于拓扑分类 D, 具有整数拓扑不变量 [314]。通过简单计算, 上面七个拓扑区域的 Chern 数依次为 $0, -1, 0, +2, 0, -1, 0$, 此时拓扑超导体中 Chern 数可以等于 2, 意味着边界处有两个 Majorana 费米子 (Majorana 费米子的数目等于体系的 Chern 数)。随着铁磁原子变稀疏, 还可以出现更大的 Chern 数以及更多的 Majorana 费米子。如图 7-12 左图所示, 在某些参数范围内, 体系的 Chern 数可以超过 10 甚至达到 15, 这是因为有更多的费米面参与进来了。虽然体系的 Chern 数很大, 但是与之对应的拓扑超导体的能隙却很小, 远小于近邻引入的 s 波超导配对势强度。这个劣势可能会使得二维铁磁原子格子中大的 Chern 数, 即多个 Majorana 费米子很难被实现。当铁磁原子变得非常稀疏时, 已经很难简单地用 Chern 数来区分, 因为 Chern 数可以变得非常大, 取值范围太广, 很难在拓扑相图中标记出来。这里选择用 Chern 数的奇偶性来给出相图如图 7-12 右图所示, 黑色表示奇数而白色表示偶数。虽然相图看起来比较简单, 但是已经丢失了太多的信息, 变得意义不大。跟前面的一维铁磁原子链相比, 二维铁磁原子格子虽然只是简单地扩展了一个维度, 但实际上在拓扑性质上却有很大的不同 [314]。两者虽然都属于拓扑分类 D, 但是拓扑不变量却不同, 一维体系具有 Z_2 不变量, 最多只有一个 Majorana 费米子, 而二维系统具有 Z 不变量, 原则上讲可以有任意多的 Majorana 费米子。

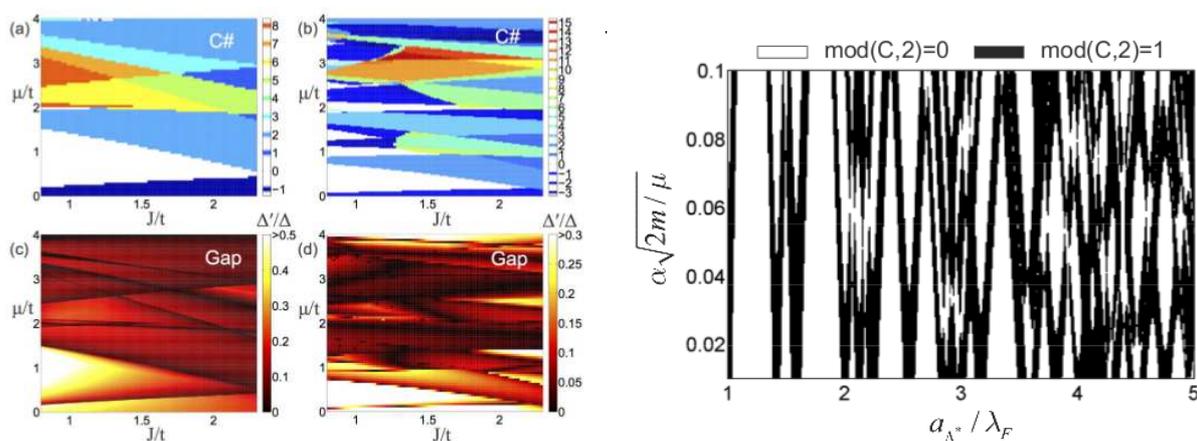


图 7-12: 左图: 二维铁磁原子格子的拓扑相图, (a) 和 (b) 对应 Chern 数, (c) 和 (d) 对应超导能隙大小。(a) 和 (b) [(c) 和 (d)] 表示每 2×2 (3×3) 超导表面层格点中有一个铁磁原子。右图: 铁磁原子很稀疏的情况下系统的 Chern 数, 白色表示 Chern 数为偶, 黑色表示 Chern 数为奇。摘自文献 [311]。

7.3.5 其它方案

在有效 p 波超导体中, 除了前面讲的几种常见的设计方案外, 还有一些其它候选。在这一小节, 我们主要讨论一下具有时间反演对称的一维拓扑超导体 [303, 326, 327]。这类拓扑超导体跟时间反演对称破缺的半导体一维纳米线以及一维铁磁原子链模型明显不

同，是一类新的拓扑超导体，对一维体系是一个很好的补充。如图 7-13 (a) 所示，纳米线放在两个超导体之间，超导体的相位差可以用磁通来调控（假设磁通远离纳米线不会破坏线中的时间反演对称性），只有相位差为零或者 π 的时候体系是时间反演对称的。当相位差为零的时候，体系始终是拓扑平凡的（在本小节最后会有讨论）。这里主要分析相位差为 π 时体系为拓扑非平凡的条件。

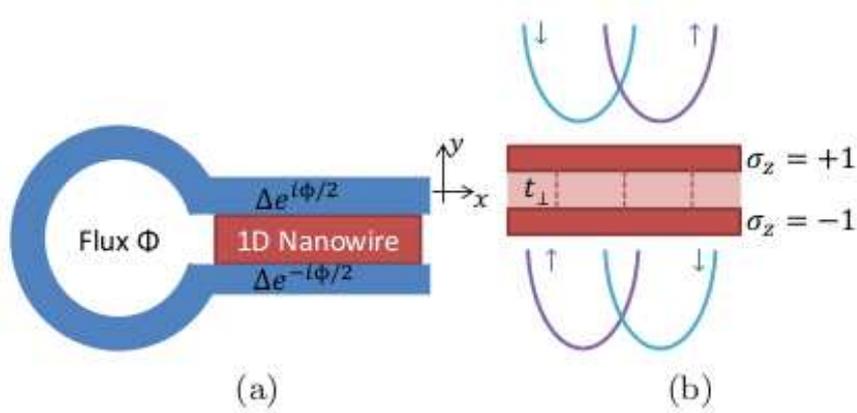


图 7-13: (a) 实现时间反演对称的一维拓扑超导体的一般模型。半导体一维纳米线放在两个超导体之间，两个超导体的相位差由磁通调节。(b) 实现 (a) 中模型的具体方案。两根纳米线中自旋轨道耦合有效场强度相同方向相反，感受到的超导配对强度相同相位差 π 。两根线之间有非零的跃迁。摘自文献 [326]。

最简单的模型就是图 7-13 (b) 所示的双纳米线，两根线感受到的超导配对强度相同相位差 π ，具体的哈密顿量可写成

$$H = \sum_k \psi_k^\dagger H_{\text{BdG}}(k) \psi_k, \quad (7.36)$$

$$H_{\text{BdG}}(k) = (\xi_k + 2\lambda \sin k s_z \sigma_z - t_\perp \sigma_x) \tau_z + \Delta \sigma_z \tau_x, \quad (7.37)$$

$$\psi_k^\dagger = (c_k^\dagger, -i s_y c_{-k}) \quad c_k^T = (c_{1\uparrow k}, c_{1\downarrow k}, c_{2\uparrow k}, c_{2\downarrow k}). \quad (7.38)$$

这里， \mathbf{s} ， $\boldsymbol{\sigma}$ 和 $\boldsymbol{\tau}$ 分别表示自旋空间，上下两根纳米线以及粒子-空穴空间的泡利矩阵， $\xi_k = 2t(1 - \cos k) - \mu$ ， t_\perp 描述了纳米线之间的跃迁。很显然，在 $H_{\text{BdG}}(k)$ 中， s_z 是个守恒量，我们可以很自然地把系统分成 $s_z = \pm 1$ 两部分，两部分之间是满足时间反演对称的。我们以 $s_z = +1$ 为例来看一下体系中 Majorana 费米子存在的条件。通过一个么正变换 $U = e^{i\frac{\pi}{4}(1-\sigma_z)(1-\tau_z)}$ ， $H_{\text{BdG}}(k)$ 变成

$$\tilde{H}_{\text{BdG}}(k) = (\xi_k + 2\lambda \sin k \sigma_z) \tau_z - t_\perp \sigma_x + \Delta \tau_x. \quad (7.39)$$

这个哈密顿量跟之前讲过的 Das Sarma 小组提出的半导体一维纳米线模型完全等价 [289]，只需要把线间跃迁 t_\perp 看成外加磁场即可。当 $t_\perp^2 > \mu^2 + \Delta^2$ 时，体系为一维拓扑超导体有一个 Majorana 费米子出现在端点处。同样地，对于 $s_z = -1$ 而言，

当 $t_{\perp}^2 > \mu^2 + \Delta^2$ 时，体系中也有一个 Majorana 费米子且与 $s_z = +1$ 中的满足时间反演对称性，是 Kramer 简并的。因此，时间反演对称的一维拓扑超导体中可以有一对 Majorana 费米子同时出现在体系的一端，而时间反演对称破缺的半导体一维纳米线跟一维铁磁链中一端最多只有一个 Majorana 费米子。

在刚刚的模型中，两根纳米线的自旋轨道耦合（有效磁场强度相同方向相反）和超导配对（配对势强度相同相位差 π ）的选择是很特殊的，接下来把它推广到更一般的情况。将 $H_{\text{BdG}}(k)$ 中的自旋轨道耦合项 $2\lambda \sin k s_z \sigma_z \tau_z$ 和超导配对 $\Delta \sigma_z \tau_x$ 分别替换成 $[\lambda_1(1 + \sigma_z) + \lambda_{-1}(1 - \sigma_z)] \sin k s_z \tau_z$ 和 $[\Delta_1(1 + \sigma_z)/2 + \Delta_{-1}(1 - \sigma_z)/2] \tau_x$ ，此外两根线的化学势也一般性地设成不同 [303]。这时候很难通过一个幺正变换得到类似方程 (7.39) 那么简单的形式，要确定体系 Majorana 费米子存在的条件只能从拓扑不变量入手。由于体系具有手征对称性，可以通过一个幺正变换使得 $H_{\text{BdG}}(k)$ 变成只有非对角块的形式，

$$e^{i(\pi/4)\tau_x} H_{\text{BdG}}(k) e^{-i(\pi/4)\tau_x} = \begin{pmatrix} 0 & A_k \\ A_k^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.40)$$

之前提到 s_z 是守恒量， A_k 又可以分成时间反演对称的 $s_z = \pm 1$ 两部分，我们只需要研究 $s_z = +1$ 部分即可。体系属于拓扑分类 DIII，具有 Z_2 的拓扑不变量，由 Winding 数 N 的奇偶性 $(-1)^N$ 来表征 [314]。有关 Winding 数 N 的计算方法在章节 7.3.3 中已经详细讨论过了，简单地说就是看 $\det A_k^\dagger = t_{\perp}^2 + \Delta_1 \Delta_{-1} - \epsilon_1 \epsilon_{-1} - i(\Delta_1 \epsilon_{-1} + \Delta_{-1} \epsilon_1) [\epsilon_{\sigma} = 2t(1 - \cos k) - 2\lambda_{\sigma} \sin k - \mu_{\sigma}]$ 与实轴的两个交点的正负即可，同号则 $N = 0$ ， $(-1)^N = 1$ 对应拓扑平凡，异号则 $N = \pm 1$ ， $(-1)^N = -1$ 为拓扑非平凡。具体地，

$$(-1)^N = \prod_{k=k_1, k_2} \text{sgn}(t_{\perp}^2 + \Delta_1 \Delta_{-1} + \epsilon_1^2 \Delta_{-1} / \Delta_1), \quad (7.41)$$

$$\epsilon_1 = 2 \sin k \frac{\lambda_{-1} - \lambda_1}{1 + \Delta_{-1} / \Delta_1} + \frac{\mu_{-1} - \mu_1}{1 + \Delta_{-1} / \Delta_1}, \quad (7.42)$$

其中 k_1, k_2 是 $\det A_k^\dagger$ 与实轴两个交点对应的动量。从上面两个公式我们可以很自然地得到以下几个拓扑非平凡的必要条件（严格的拓扑条件需要数值计算，这里不予讨论），

$$\Delta_1 \Delta_{-1} < 0, \quad (7.43)$$

$$t_{\perp}^2 + \Delta_1 \Delta_{-1} > 0 \quad t_{\perp} \neq 0, \quad (7.44)$$

$$\lambda_1 \neq \lambda_{-1}. \quad (7.45)$$

从这里可以看出，对于两根纳米线的超导配对而言只需要相位差 π 并没有要求强度相同，这放宽了之前特殊模型下强度相同的要求。对于自旋轨道耦合而言只有两根线中各向异性的部分起作用，这跟之前的特殊模型是一致的，因此对于自旋轨道耦合而言始终

可以简化成只有各向异性的部分。

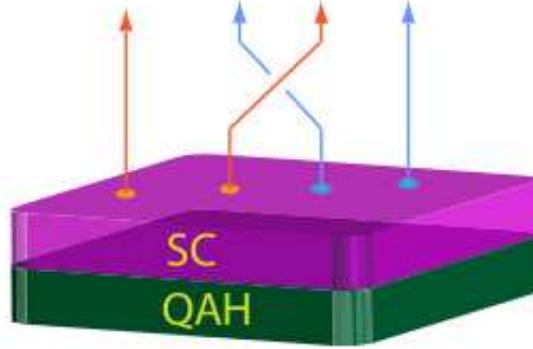


图 7-14: 量子反常霍尔绝缘体放在传统 s 波超导体下面，由于近邻效应，超导配对会渗透到量子反常霍尔绝缘体中去。摘自文献 [312]。

7.4 基于量子反常霍尔绝缘体的拓扑超导体

在上一章节中，我们着重讨论了现在最受关注的有效 p 波超导体。除了有效 p 波超导体，将传统 s 波超导配对通过近邻效应引入量子反常霍尔绝缘体（参见图 7-14）也可以实现人造拓扑超导体 [312, 313, 328]。该拓扑超导体利用的是量子反常霍尔绝缘体的边界态，不同于有效 p 波超导体在费米面处实现等价的 p 波配对。这类拓扑超导体是 Qi 等人提出来的，其中量子反常霍尔绝缘体是在拓扑绝缘体中进行磁性掺杂得到的 [312]。最简单的量子反常霍尔哈密顿量在 Γ 点附近低能近似形式为 [329]

$$H_{\text{QAH}} = \sum_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}^{\dagger} h_{\text{QAH}}(\mathbf{p}) \psi_{\mathbf{p}}, \quad (7.46)$$

$$h_{\text{QAH}}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} m(p) & A(p_x - ip_y) \\ A(p_x + ip_y) & -m(p) \end{pmatrix},$$

其中 $m(p) = m + Bp^2$ ($B > 0$)， $\psi_{\mathbf{p}} = (c_{p\uparrow} \ c_{p\downarrow})$ 。该哈密顿量破坏了时间反演对称性，属于拓扑分类 A [314]，具有整数拓扑不变量，用 Chern 数 C_1 来表征的 [330]，具体计算方法见章节 7.2 中公式 (7.8)。通过简单计算可知，体系能隙闭合的条件为 $m = 0$ ，很自然地将系统分成两个拓扑区域， $m > 0$ 以及 $m < 0$ 。当 $m < 0$ 时， $C_1 = 1$ ，体系为量子反常霍尔绝缘体，有一个边界态。而当 $m > 0$ 时， $C_1 = 0$ ，体系为拓扑平凡的绝缘体。

把量子反常霍尔绝缘体跟传统超导体接触时，超导配对就会通过近邻效应进入量子

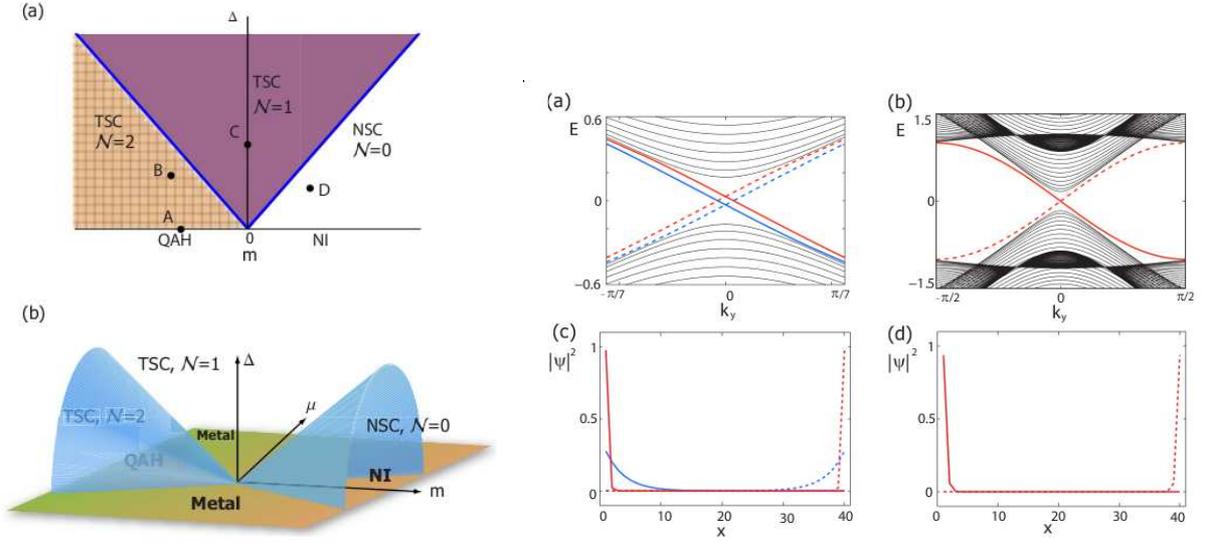


图 7-15: 左图: 量子反常霍尔绝缘体与 s 波超导体合成系统在 $\mu = 0$ (a) 以及 $\mu \neq 0$ (b) 时的拓扑相图。QAH 和 NI 分别表示量子反常霍尔绝缘体和普通绝缘体。右图: 一个方向 (x) 受限情况下, BdG 哈密顿量 H_{BdG} 的本征值 [(a) 和 (b)] 以及相应零能本征态的实空间几率分布 [(c) 和 (d)]。(a) 和 (c) 对应有两个 Majorana 边界态的情况而 (b) 和 (d) 中只有一个 Majorana 费米子。摘自文献 [312]。

反常霍尔绝缘体, 此时 BdG 哈密顿量可写为

$$H_{\text{BdG}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}^{\dagger} \begin{pmatrix} h_{\text{QAH}}(\mathbf{p}) - \mu & i\Delta\sigma^y \\ -i\Delta^*\sigma^y & -h_{\text{QAH}}^*(-\mathbf{p}) + \mu \end{pmatrix} \Psi_{\mathbf{p}}, \quad (7.47)$$

其中 $\Psi_{\mathbf{p}} = (c_{p\uparrow} \ c_{p\downarrow} \ c_{-p\uparrow}^{\dagger} \ c_{-p\downarrow}^{\dagger})^T$ 。下面来具体分析下该体系的拓扑性质。该体系中时间反演对称破缺只有粒子-空穴对称存在, 属于拓扑分类 D, 具有 Z 的拓扑不变量, 用 Chern 数来表征 [314]。我们先从化学势为零这个最简单的情况入手, 此时体系的能隙闭合条件为 $|\Delta \pm m| = 0$, 将系统分成四个区域, 由于超导配对 Δ 的正负不会改变拓扑性以及 Chern 数, 因此在拓扑相图中只给出了 $\Delta \geq 0$ 的区域如图 7-15 左图 (a) 所示。我们发现 Chern 数 C_1 可以是 0, 1, 或者 2, 这可以通过在各个拓扑区域内选择代表点来理解。对于 $C_1 = 0$ 的区域, 可以选择代表点 $\Delta = 0, m > 0$, 这其实就是两份的普通绝缘体, 拓扑是平凡的。对于 $C_1 = 2$ 的区域, 可以选择代表点 $\Delta = 0, m < 0$, 这其实就是两份量子反常霍尔绝缘体, 每个量子反常霍尔绝缘体的 Chern 数为 1, 有一个边界态, 体系总的 Chern 数为 2, 有两个边界态 (Majorana 费米子)。需要强调的是在这个拓扑区域中, 量子反常霍尔绝缘体的边界态以及近邻效应引入的超导配对实现了拓扑超导体。这类超导体与有效 p 波超导体最大的不同在于化学势处于块体材料的能隙中, 没有费米面被占据。这使得基于量子反常霍尔态的拓扑超导体可能存在很多不同于有效 p 超导体的有意思的性质。在 $C_1 = 0$ 跟 $C_1 = 2$ 之间还存在 $C_1 = 1$ 的拓扑区域,

此时可以选取代表点 $\Delta > 0$, $m = 0$, BdG 哈密顿量可以块对角化成

$$H_{\text{BdG}}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \tilde{\Psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \begin{pmatrix} h_{+}(\mathbf{p}) & \\ & -h_{-}(-\mathbf{p})^{*} \end{pmatrix} \tilde{\Psi}_{\mathbf{p}}$$

$$\text{其中 } h_{\pm}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \pm|\Delta| + Bp^2 & A(p_x - ip_y) \\ A(p_x + ip_y) & -(\pm|\Delta| + Bp^2) \end{pmatrix}. \quad (7.48)$$

这个哈密顿量可以等价于两份量子反常霍尔哈密顿量参见公式 (7.47), 对 $h_{\pm}(\mathbf{p})$ 而言, $m = \pm|\Delta|$, 因此 $h_{+}(\mathbf{p})$ 的 Chern 数为 0, $h_{-}(\mathbf{p})$ 的 Chern 数为 1, 体系总的 Chern 数为 1。当化学势有限的时候, 可以做类似上面的分析, 拓扑相图如图 7-15 左图 (b) 所示。从 $C_1 = 2$ 和 $C_1 = 1$ 的拓扑分别选择一个代表点来研究一下体系的本征值以及本征态。 $C_1 = 2$ 对应的是图 7-15 右图 (a) 和 (c), 跟预期的一样, 体系的每一边都有两个边界态即 Majorana 费米子, 而 $C_1 = 1$ 对应的图 7-15 右图 (b) 和 (d) 中只有一个 Majorana 边界态。

除了上面讨论的时间反演对称性破缺的拓扑绝缘体外 [312], 理论上预言在 Rashba 自旋轨道耦合和交换场共同作用下的单层石墨烯也可以实现量子反常霍尔绝缘体 [331]。该量子反常霍尔态与传统 s 波超导体接触也可以实现二维拓扑超导体 [328]。我们发现在非常低掺杂甚至零掺杂的时候, 体系可以有很大的 Chern 数达到 4, 对应 4 个 Majorana 边界态。更重要的是, 体系有一个非常大的超导能隙, 甚至可以比近邻效应引入的超导配对还要大一个量级, 跟常见的有效 p 波超导体中能隙始终比近邻导致的超导配对小形成了鲜明的对比。我们会在第 8 章中具体介绍在单层石墨烯中实现具有大的 Chern 数和大的超导能隙的拓扑超导体的相关工作。

第八章 单层石墨烯中实现具有大 Chern 数和大体能隙的拓扑超导体

在第 7 章中我们已经介绍了包括有效 p 波超导体和基于量子反常霍尔绝缘体的拓扑超导体在内的人造拓扑超导体。在这些拓扑超导体中，拓扑不变量为整数的才可能有多个 Majorana 费米子，对于一维（二维）拓扑超导体而言，系统属于拓扑分类 BDI [298–303, 306–309] (D [310–313])。实际上，一维体系中的拓扑分类 BDI 很容易变成 D，而 D 中最多只有一个 Majorana 费米子，这在章节 7.2 中已经讨论过了。对于二维拓扑超体中的拓扑分类 D 而言，它可以稳定存在，可能有多个 Majorana 费米子。目前来说，属于 D 的二维拓扑超导体中 Majorana 费米子的数目或者 Chern 数一般为 0, 1, 2 [311–313]。要出现更多的 Majorana 费米子或者更大的 Chern 数则要求体系的化学势非常大（掺杂很高）[310, 311]，这很难在实验上实现。

我们的目标就是要找到一个有多个 Majorana 费米子且实验上有可能实现的拓扑超导体。最近，我们在单层石墨烯中提出了相关的理论方案。单层石墨烯在 Rashba 自旋轨道耦合和交换场的共同作用下可以变成量子反常霍尔绝缘体 [331]，该量子反常霍尔绝缘体跟传统 s 波超导体接触有可能实现属于拓扑分类 D 的二维拓扑超导体 [328]。很有意思的是，在 Dirac 点附近非常低甚至零掺杂的时候，基于量子反常霍尔态的拓扑超导体中的 Chern 数可以达到 4，对应四个 Majorana 边界态。这么低的掺杂在实验上很容易实现。除此之外，我们发现该拓扑超导体还有一个很大的优势，它的体能隙很大，可以比近邻效应引入的超导配对势强度大，有的时候甚至可以大一个量级。这跟之前广泛研究的有效 p 波超导体中体能隙始终比近邻引入的超导配对小形成非常鲜明的对比。我们知道大的拓扑非平凡的能隙对拓扑绝缘体 [279, 280]，拓扑晶体绝缘体 [332] 以及量子反常霍尔绝缘体 [332–334] 的应用可能起着最重要的作用，同样地，我们这里在拓扑超导体中发现的大的体能隙对拓扑超导体和 Majorana 费米子的实现以及应用也可能非常重要。总的来说，我们利用基于单层石墨烯的量子反常霍尔绝缘体跟 s 波超导体的近邻耦合实现了一个二维拓扑超导体，它具有大的 Chern 数和大的体能隙。在本章中我们来详细讨论一下该拓扑超导体。

8.1 单层石墨烯中的量子反常霍尔态

8.1.1 哈密顿量和能谱

在讨论拓扑超导体之前，我们先来研究一下它的最基本组成部分，即基于单层石墨烯的量子反常霍尔绝缘体。当 Rashba 自旋轨道耦合和交换场存在的时候，单层石墨烯的紧束缚哈密顿量可以写成 [331]

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + i\lambda \sum_{\langle i,j \rangle \alpha \beta} (\boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} \times \mathbf{d}_{ij})_z c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} + V_z \sum_{i\alpha} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_z^{\alpha\alpha} c_{i\alpha}, \quad (8.1)$$

其中 $\langle i, j \rangle$ 表示的是最近邻格点近似， $c_{i\alpha}$ ($c_{i\alpha}^\dagger$) 描述的是在位置 i 处湮灭（产生）一个自旋为 α 的电子。哈密顿量中第一项是最近邻跃迁， $t = 2.7$ eV [124] 是跃迁能。第二项表示的是 Rashba 自旋轨道耦合， λ ， $\boldsymbol{\sigma}$ 和 \mathbf{d}_{ij} 分别为耦合强度，自旋空间的泡利矩阵和从格点 j 到格点 i 的单位矢量。最后一项对应的是交换场。

为了方便计算，我们把上述哈密顿量变换到动量空间，

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}}^\dagger H_e(\mathbf{k}) \Phi_{\mathbf{k}}, \quad (8.2)$$

$$\Phi_{\mathbf{k}}^\dagger = (\psi_{A\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}), \psi_{B\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}), \psi_{A\downarrow}^\dagger(\mathbf{k}), \psi_{B\downarrow}^\dagger(\mathbf{k})), \quad (8.3)$$

$$H_e(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} V_z & f(\mathbf{k}) & 0 & h_1(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & V_z & h_2^*(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & h_2(\mathbf{k}) & -V_z & f(\mathbf{k}) \\ h_1^*(\mathbf{k}) & 0 & f^*(\mathbf{k}) & -V_z \end{pmatrix}, \quad (8.4)$$

$$f(\mathbf{k}) = -t \left[(2 \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2\sqrt{3}} + \cos \frac{k_y}{\sqrt{3}}) - i(2 \cos \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2\sqrt{3}} - \sin \frac{k_y}{\sqrt{3}}) \right], \quad (8.5)$$

$$h_1(\mathbf{k}) = -\lambda \left[\left(\cos \frac{k_x}{2} + \sqrt{3} \sin \frac{k_x}{2} \right) \sin \frac{k_y}{2\sqrt{3}} + \sin \frac{k_y}{\sqrt{3}} \right] - i\lambda \left[-\cos \frac{k_y}{\sqrt{3}} + \cos \frac{k_y}{2\sqrt{3}} \left(\cos \frac{k_x}{2} + \sqrt{3} \sin \frac{k_x}{2} \right) \right], \quad (8.6)$$

$$h_2(\mathbf{k}) = \lambda \left[\left(\sqrt{3} \sin \frac{k_x}{2} - \cos \frac{k_x}{2} \right) \sin \frac{k_y}{2\sqrt{3}} - \sin \frac{k_y}{\sqrt{3}} \right] + i\lambda \left[\cos \frac{k_y}{\sqrt{3}} - \cos \frac{k_y}{2\sqrt{3}} \left(\cos \frac{k_x}{2} - \sqrt{3} \sin \frac{k_x}{2} \right) \right]. \quad (8.7)$$

这里 $\psi_{i\alpha}^\dagger(\mathbf{k})$ 表示在格点 i (i 可以是 A 或 B) 处产生一个动量为 \mathbf{k} (相对于 Γ 点而言)，自旋为 α 的电子。通过对角化哈密顿量 $H_e(\mathbf{k})$ ，我们可以得到单层石墨烯的能带结构，如图 8-1 所示。我们知道裸的单层石墨烯是没有能隙的，见图 8-1 (a)。在单层石墨烯中加入交换场或者 Rashba 自旋轨道耦合，分别对应图 8-1 (b) 和 (c)，体系仍然

没有能隙。只有当 Rashba 自旋轨道耦合和交换场同时存在的时候，体系才打开一个能隙，如图 8-1 (d) 所示，这时候体系的拓扑才是可以定义的。

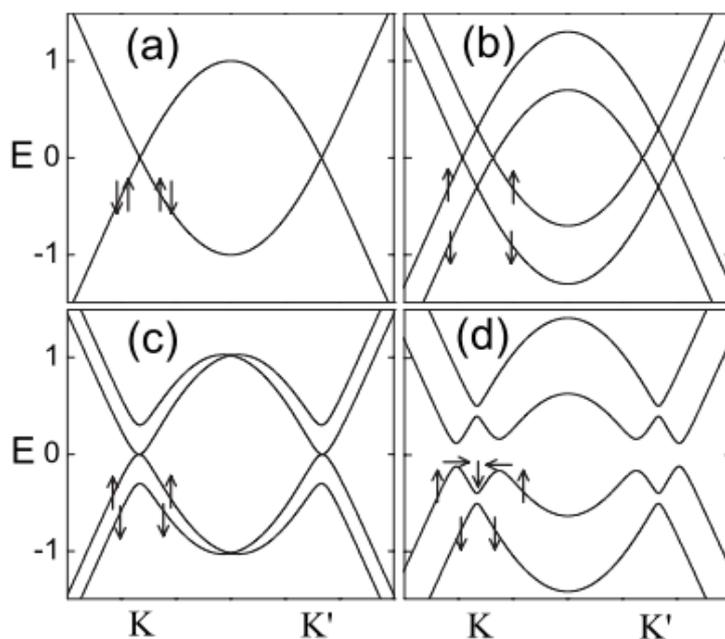


图 8-1: 哈密顿量为 $H_c(\mathbf{k})$ 的单层石墨烯的能带结构。(a) 裸的单层石墨烯，即没有外加的自旋轨道耦合和交换场。(b) 只有交换场存在。(c) 只有 Rashba 自旋轨道耦合存在。(d) 交换场和 Rashba 自旋轨道耦合同时存在。摘自文献 [331]。

8.1.2 Chern 数和量子反常霍尔态

在本小节中，我们来具体讨论一下体系的拓扑性质。体系中时间反演对称性破缺，属于拓扑分类 A，具有整数的拓扑不变量，是由 Chern 数 C_1 来表征的 [314]。根据公式 (7.8) 可以计算得到体系的 Chern 数 $C_1 = 2$ [331]。为了弄清 Chern 数的来源，我们给出了 Berry 曲率的动量空间分布，如图 8-2 左图所示。Berry 曲率在 Dirac 点附近非常大，其它地方几乎可以忽略不计，更重要的是两个不等价的 Dirac 点处的 Berry 曲率大小相等符号相同，此时两个不等价的 Dirac 点对 Chern 数的贡献相同，都为 $C_1 = 1$ 。需要指出的是这里非零的 Chern 数是跟量子化的电荷霍尔电导严格一一对应的，这种现象被称为量子反常霍尔效应，体系相应地被称为量子反常霍尔绝缘体。量子反常霍尔效应是相对于传统的量子霍尔效应而言的，因为两者都能实现量子化的电荷霍尔电导，但实现方式完全不同，量子反常霍尔效应不再需要 Landau 能级。

拓扑非平凡的体系中一定存在无能隙的边界态。这些边界态可以通过计算石墨烯纳米带的本征值和本征态得到。以 zigzag 边界的石墨烯纳米带为例给出了其在交换场和 Rashba 自旋轨道耦合的作用下的能谱，如图 8-2 右图 (a) 所示。可以很清楚地看到在体能隙中出现了新的无能隙的边界态（边界态是通过波函数空间分布确定的），每个

费米能处都有四个边界态，我们将某个费米能处的分别标记为 A, B, C 和 D 来分析一下。由群速度可知，A 和 B (C 和 D) 沿着同一方向 $-x$ ($+x$) 传播。而且，从图 8-2 右图 (b) 中波函数实空间几率分布可以知道 A 和 B 局域在同一边界，这表明在同一边界处有两个沿相同方向传播的边界态，跟前面计算得到的 Chern 数为 2 是一致的。我们将上面这些出现在体能隙中的无能隙边界态称为量子反常霍尔态。

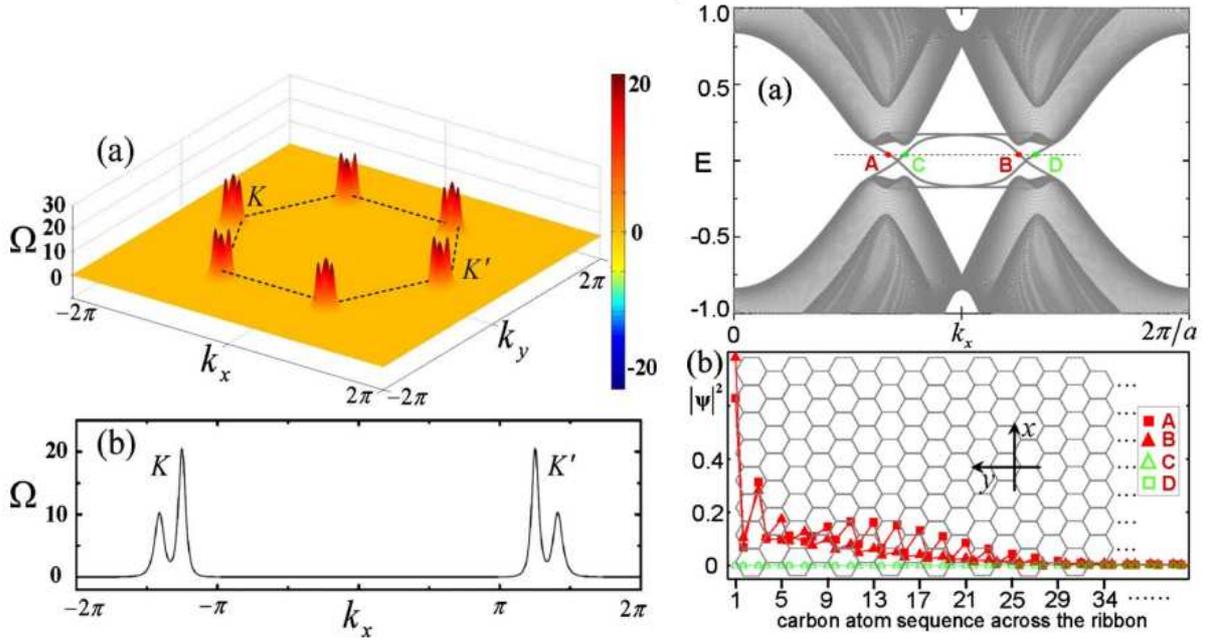


图 8-2: 左图: Berry 曲率 Ω 的动量空间分布。右图: (a) 交换场和 Rashba 自旋轨道耦合共同作用下 zigzag 边界的石墨烯纳米带的能谱。A, B, C 和 D 表示同一费米能处的四个边界态。(b) 四个边界态的实空间几率分布，这里只给出了纳米带的一部分。A 和 B 局域在左边界而 C 和 D 在该区域几率分布完全为零。摘自文献 [331]。

8.2 基于单层石墨烯的拓扑超导体

8.2.1 哈密顿量

当基于单层石墨烯的量子反常霍尔绝缘体跟传统 s 波超导体接触的时候，超导配对可以通过近邻效应进入到单层石墨烯中去。此时，体系的紧束缚哈密顿量为 [331, 335]

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + i\lambda \sum_{\langle i,j \rangle \alpha\beta} (\boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} \times \mathbf{d}_{ij})_z c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} - \mu \sum_{i\alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} \\
 & + V_z \sum_{i\alpha} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_z^{\alpha\alpha} c_{i\alpha} + \Delta \sum_i (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}), \quad (8.8)
 \end{aligned}$$

μ 和 Δ 分别表示化学势和超导配对势的强度。变换到动量空间写成 BdG 哈密顿量的形

式为

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}}^{\dagger} H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) \Phi_{\mathbf{k}}, \quad (8.9)$$

$$\Phi_{\mathbf{k}}^{\dagger} = (\psi_{A\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}), \psi_{B\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}), \psi_{A\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}), \psi_{B\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}), \\ \psi_{A\downarrow}(-\mathbf{k}), \psi_{B\downarrow}(-\mathbf{k}), -\psi_{A\uparrow}(-\mathbf{k}), -\psi_{B\uparrow}(-\mathbf{k})), \quad (8.10)$$

$$H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_e(\mathbf{k}) - \mu & \Delta \\ \Delta & \mu - \sigma_y H_e^*(-\mathbf{k}) \sigma_y \end{pmatrix}. \quad (8.11)$$

由于超导配对的引入，体系多了一个粒子-空穴自由度，维度扩大了一倍，这反映在基矢的变化上 [参见公式 (8.10) 和 (8.3)]。\$H_e(\mathbf{k})\$ 已经在公式 (8.4) 中给出了，为了后面方便讨论我们给出了其在 Dirac 点，即 \$K = (4\pi/3, 0)\$ (\$\tau = 1\$) 和 \$K' = (-4\pi/3, 0)\$ (\$\tau = -1\$) 附近的低能有效哈密顿量

$$H_e^{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} V_z & v_f(\tau k_x - ik_y) & 0 & i\lambda_R(1 - \tau) \\ v_f(\tau k_x + ik_y) & V_z & -i\lambda_R(1 + \tau) & 0 \\ 0 & i\lambda_R(1 + \tau) & -V_z & v_f(\tau k_x - ik_y) \\ i\lambda_R(\tau - 1) & 0 & v_f(\tau k_x + ik_y) & -V_z \end{pmatrix}, \quad (8.12)$$

这里 \$v_f = 3t/2\$, \$\lambda_R = 3\lambda/2\$。

8.2.2 拓扑不变量和拓扑相图

在本小节中，我们主要讨论一下 BdG 哈密顿量 \$H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})\$ 的拓扑性质。在研究体系的拓扑性质之前，先确定能隙闭合条件，因为能隙闭合决定了拓扑区域的边界。由于粒子-空穴对称性的存在，哈密顿量 \$H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})\$ 的能隙闭合等价于存在零能态，有零能态的条件可以通过计算哈密顿量的行列式为零得到。体系的能隙在动量为 \$\Gamma\$, \$M\$ 和 \$K\$ 的时候闭合，相应的闭合条件分别为 \$(\mu \pm 3t)^2 = V_z^2 - \Delta^2\$, \$(\mu \pm t)^2 = V_z^2 - \Delta^2\$ 和 \$\mu^2 = V_z^2 - \Delta^2\$。这里 \$+\$ (\$-\$) 表示的是在动量 \$\Gamma\$ 或者 \$M\$ 处较低的 (较高的) 能带。关于能隙闭合条件的详细计算见附录 D.1。由能隙闭合条件可知，当 \$|V_z| < |\Delta|\$ 的时候，体系很显然是拓扑平凡的。而当 \$|V_z| \geq |\Delta|\$ 的时候，体系中存在十个临界的化学势，按能量由高到低排列依次为，\$\mu_{1,2} = 3t \pm \sqrt{V_z^2 - \Delta^2}\$, \$\mu_{3,4} = t \pm \sqrt{V_z^2 - \Delta^2}\$, \$\mu_{5,6} = \pm \sqrt{V_z^2 - \Delta^2}\$, \$\mu_{7,8} = -t \pm \sqrt{V_z^2 - \Delta^2}\$ 和 \$\mu_{9,10} = -3t \pm \sqrt{V_z^2 - \Delta^2}\$ (假设 \$|V_z|, |\Delta| \ll t\$)。这十个临界化学势将系统分成十一个拓扑区域。

这些区域是用 Chern 数 \$C_1\$ 来表征的，利用公式 (7.8) 可以计算得到所有拓扑区域

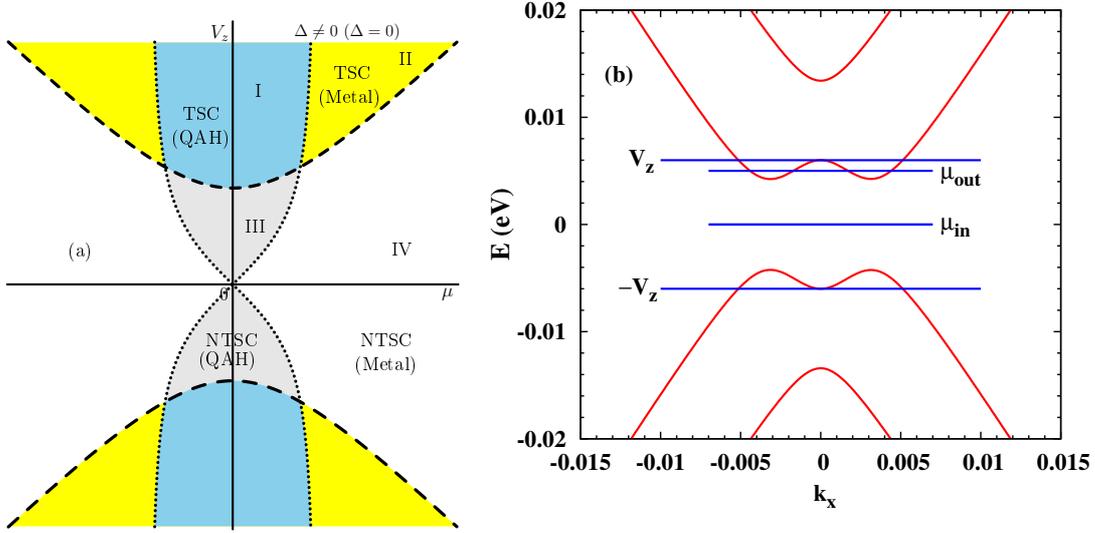


图 8-3: (a) 单层石墨烯在 (μ, V_z) 空间中的拓扑相图。 $\Delta \neq 0$ ($\Delta = 0$) 表示包含 (不包含) 近邻效应引入的 s 波超导配对。短划线代表拓扑超导体和非拓扑超导体的边界 $V_z^2 = \Delta^2 + \mu^2$ ，点线描述的是量子反常霍尔态跟金属的边界 $\mu^2 = E_0^2$ 。(b) 不包含超导配对的单层石墨烯的哈密顿量在 K 点附近做低能近似后 (H_e^{eff}) 对应的体能谱, $k_y = 0$ 。 μ_{in} (μ_{out}) 表示化学势在能隙内部 (外部)。 $V_z = 6$ meV, $\lambda = 4$ meV。摘自文献 [328]。

的 Chern 数,

$$C_1 = \begin{cases} 1 (-1), & \mu_2 < \mu < \mu_1 \\ -3 (3), & \mu_4 < \mu < \mu_3 \\ 4 (-4), & \mu_6 < \mu < \mu_5 \\ -3 (3), & \mu_8 < \mu < \mu_7 \\ 1 (-1), & \mu_{10} < \mu < \mu_9 \\ 0, & \text{其它区域} \end{cases} \quad (8.13)$$

当 $V_z > 0$ ($V_z < 0$) 的时候。在 Γ (M) 附近的时候, $|C_1| = 1$ (3), 对应一个 (三个) Majorana 费米子, 但是这些 Majorana 费米子需要非常高的掺杂, 目前实验上很难实现。与之形成鲜明对比的是, 在 Dirac 点附近非常低甚至零掺杂的时候, 体系可以有一个非常大的 Chern 数 (达到 4), 对应四个 Majorana 费米子, 这提供了一个可能实现有多个 Majorana 费米子的拓扑超导体的方案。

接下来我们主要研究 Dirac 点附近 (掺杂较低) 的情况。当 Rashba 自旋轨道耦合, 交换场和近邻引入的超导配对同时存在的时候, 我们给出了单层石墨烯的拓扑相图, 如图 8-3 (a) 所示。短划线对应的是能隙闭合条件 $V_z^2 = \mu^2 + \Delta^2$, 给出了拓扑超导体跟非拓扑超导体的边界。我们先来讨论拓扑超导体部分。为了进一步区分拓扑超导体, 我们压制了超导配对的作用, 这可以通过施加一个弱的外加磁场来实现 [305]。在没有超导配对的情况下, 单层石墨烯在 Dirac 点附近低能有效哈密顿量 H_e^{eff} 对应

的能谱如图 8-3 (b) 所示。当化学势处在能隙中的时候 ($|\mu| < E_0$), 比如说 μ_{in} , 系统表现出量子反常霍尔态的行为, Chern 数为 2 [331], 这在章节 8.1 中已经讲过。这里 $E_0 = |V_z \lambda_R| / \sqrt{V_z^2 + \lambda_R^2}$ 表示能隙的一半。量子反常霍尔态跟 s 波超导体接触后变成一个 Chern 数为 4 的拓扑超导体 [312] (见拓扑相图中的区域 I)。当化学势被调节到能隙之外即能带之中的时候, 比如说 μ_{out} , 系统表现出金属的行为, 每个 Dirac 点附近有两个费米面 (我们这里只给出了 K 点附近的结果)。当超导配对通过近邻效应引入后, 这四个费米面附近的有效配对都等价于 p 波超导体的配对, 每一个有效 p 波超导体都有一个 Majorana 费米子, 这跟 Dirac 点附近 Chern 数为 4 是一致的。这个来源于金属的有效 p 波超导体在相图中被标记为区域 II。同样地, 非拓扑超导体也可以被分成两个区域, 基于量子反常霍尔态的区域 III 和来自金属态的区域 IV。

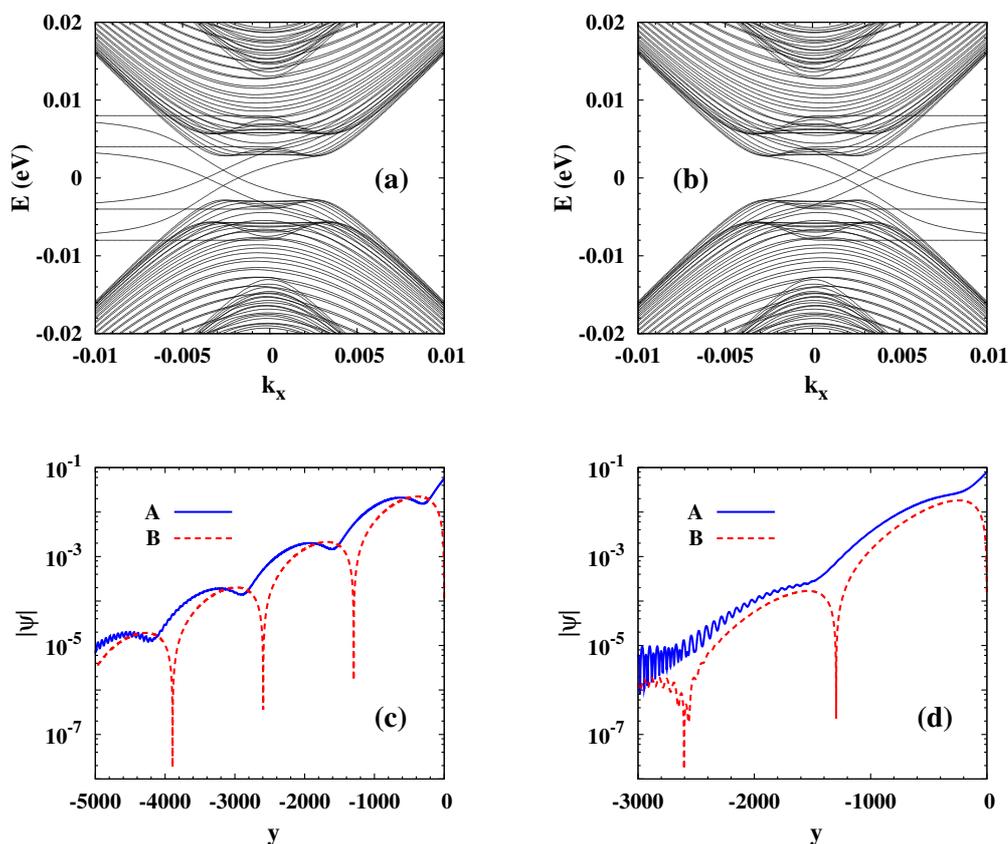


图 8-4: (a) 和 (b) 分别表示 zigzag 边界的石墨烯纳米带在 K 和 K' 点附近的能谱。这里考虑了 Rashba 自旋轨道耦合, 交换场以及近邻引入的 s 波超导配对。(c) ((d)) 表示 K 点附近具有较小 (较大) 动量, 群速度 $v_x > 0$ 的 Majorana 边界态波函数的实空间几率幅 $|\psi|$ 。这里只给出了靠近 $y = 0$ 的一边。波函数几率幅在离边界较远的地方会有一些涨落, 这些涨落来自于数值误差。 $V_z = 6$ meV, $\lambda = 4$ meV, $\mu = 0$, $\Delta = 2$ meV。摘自文献 [328]。

8.2.3 Majorana 边界态

在上一小节中我们详细讨论了拓扑相图，其中拓扑超导体可以分为有效 p 波超导体和基于量子反常霍尔态的拓扑超导体两类。之前有关有效 p 波超导体的研究已经非常多了，在本小节中我们主要关注基于量子反常霍尔态的拓扑超导体。为了得到拓扑超导体中的 Majorana 边界态，我们研究了传统的具有 zigzag 边界和 armchair 边界的石墨烯纳米带，石墨烯纳米带要足够宽使得两边 Majorana 边界态的交叠足够小，具体的数值计算方法见附录 D.2。在图 8-4 (a) 和 (b) 中，我们分别给出了 zigzag 边界的石墨烯纳米带在 K 和 K' 点附近的能谱。我们发现每个谷附近有四个零能态，这八个零能态可以分成两部分，四个沿着 $+x$ ($-x$) 方向传播（由群速度 v_x 的正负决定的）。而且四个沿着相同方向传播的态局域在同一边界，这跟之前计算得到的 Chern 数为 4 是一致的，表明这八个零能态是拓扑保护的 Majorana 边界态。我们选择了 K 点附近群速度为正的两个 Majorana 边界态来研究一下波函数的空间分布，图 8-4 (c) 和 (d) 分别表示动量较小和较大的 Majorana 边界态对应的实空间几率幅。这两个 Majorana 边界态都表现出明显的震荡衰减的行为，但是两者的衰减长度明显不同。

8.2.4 拓扑超导体的能隙

上面我们讨论了基于量子反常霍尔态的拓扑超导体中的 Majorana 边界态，这些边界态是由拓扑超导体的能隙保护的。在本小节中我们主要研究不同参数比如化学势，交换场，Rashba 自旋轨道耦合以及近邻效应引入的超导配对势强度对拓扑超导体能隙的影响。

8.2.4.1 化学势对能隙的影响

如图 8-5 所示，我们给出了不同化学势下拓扑超导体能隙随近邻引入的超导配对势强度的变化。这里的化学势都选在量子反常霍尔系统的能隙内。在近邻引入的超导配对为零 $\Delta = 0$ 的时候，系统可以看成两个如图 8-3 (b) 所示的量子反常霍尔绝缘体（一个为粒子系统，另一个为空穴系统），但相对于图 8-3 (b) 所示的而言，粒子（空穴）系统会有一个能量为 $-\mu$ (μ) 的平移。此时，体系的能隙是由这两个量子反常霍尔绝缘体决定的， $E_{\text{gap}} = E_0 - |\mu|$ 。这个非零的能隙（在近邻引入的超导配对为零的时候）表明体系的能隙可能远大于近邻引入的超导配对势强度，尤其是在超导配对势强度比较小的时候。需要强调的是在没有超导配对情况下，这里讨论的基于量子反常霍尔态的拓扑超导体具有一个非零的能隙，跟之前广泛研究的有效 p 波超导体中能隙严格为零完全不一样。当超导配对势强度处在临界点 $\Delta_c = \sqrt{V_z^2 - \mu^2}$ 的时候，体系的能隙闭合。当 $0 < \Delta < \Delta_c$ 的时候，能隙随着超导配对势强度增加而单调减小，在这个过程中，能隙可以比超导配对势强度大，有时候甚至可以大一个量级。我们举几个例子来看一下， $E_{\text{gap}} = 4.02 \text{ meV}$ ($\Delta = 0.3 \text{ meV}$) 在 $\mu = 0$ 的

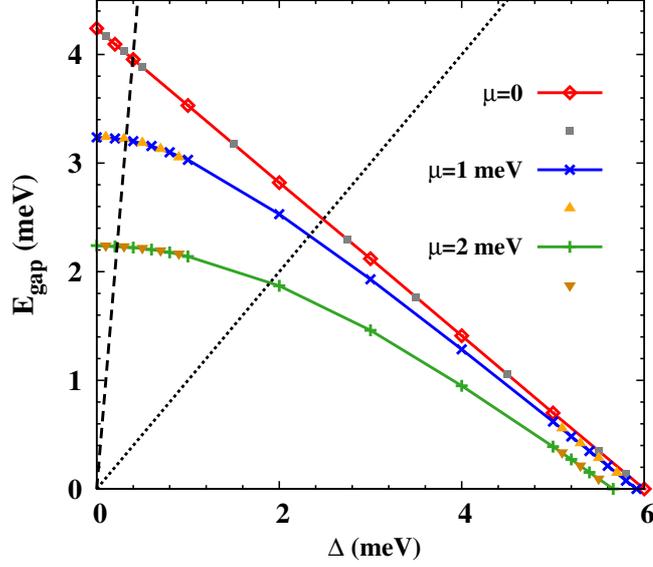


图 8-5: 基于量子反常霍尔态的拓扑超导体的能隙随邻近引入的超导配对势强度的变化。带有 \diamond , \times 和 $+$ 的实线分别对应化学势为 0, 1, 2 meV 的数值结果, 符号 \blacksquare , \blacktriangle 和 \blacktriangledown 分别表示化学势为 0, 1, 2 meV 的解析结果。需要指出的是对于化学势非零的解析结果, 我们只计算了 $\Delta \sim 0$ 和 $\Delta \sim \Delta_c$ 两个极限。另外, 点线(短划线)描述的是 $E_{\text{gap}} = \Delta$ ($E_{\text{gap}} = 10\Delta$)。 $V_z = 6$ meV, $\lambda = 4$ meV。摘自文献 [328]。

时候; $E_{\text{gap}} = 3.22$ meV ($\Delta = 0.3$ meV) 当 $\mu = 1$ meV 的时候; $E_{\text{gap}} = 2.23$ meV ($\Delta = 0.2$ meV) 在 $\mu = 2$ meV 的时候。这里, 能隙可以比超导配对势强度远大的行为跟有效 p 波超导体中能隙始终比超导配对势强度小形成了鲜明的对比。这就意味着我们提出的基于量子反常霍尔态的拓扑超导体可能更稳定, 更有利于实验实现。

为了更好地理解能隙的行为, 我们做了相关的解析推导。在 Dirac 点附近, BdG 哈密顿量 $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ [见公式 (8.11)] 可以展开成一个低能有效哈密顿量的形式, 即把 $H_e(\mathbf{k})$ 替换成 $H_e^{\text{eff}}(\mathbf{k})$ [见公式 (8.12)]。为了得到体系的能隙, 我们从久期方程 $\det[H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) - EI_{8 \times 8}] = 0$ 出发计算体系的本征值 E , $I_{8 \times 8}$ 是单位矩阵。经过计算整理得到

$$[\alpha_1^2 - 4V_z^2\alpha_3 + 4\alpha_1(\lambda_R^2 - \mu^2 - \mu V_z) + 4\alpha_2(\mu^2 - \lambda_R^2)]^2 - 64V_z^2\alpha_3(\lambda_R^2 - \mu^2 - \mu V_z)^2 + 8[\alpha_1\mu - 2(\mu + V_z)(\mu^2 - \lambda_R^2)][(\mu + V_z)(\alpha_1^2 - 4V_z^2\alpha_3) - 2\mu\alpha_1\alpha_2] = 0, \quad (8.14)$$

其中 $\alpha_1 = \alpha_2 - \alpha_3 + \alpha_4$, $\alpha_2 = v_f^2 k_x^2$, $\alpha_3 = E^2$, $\alpha_4 = \Delta^2 - V_z^2 + \mu^2$ 。需要说明的是这里的计算选择在 K ($\tau = 1$) 点附近, 另外由于低能有效哈密顿量是各向同性的, 我们为了方便起见把 k_y 取为零。起初是想先求解方程 (8.14) 得到本征值, 然后再对本征值求极值得到体系的能隙。经过一些计算后发现直接求解本征值非常困难, 这个想法行不通。实际上, 我们真正感兴趣的是能隙而非本征值, 能隙对应的是能量极值点, 我们只需要

得到能量极值即可。对方程 (8.14) 关于 α_2 求偏导再利用能量极值条件 $\frac{\partial \alpha_3}{\partial \alpha_2} = 0$ 可得

$$\begin{aligned} \alpha_3^3 - g_2 \alpha_3^2 - g_1 \alpha_3 - g_0 &= 0, \\ g_2 &= 3(\alpha_2 + \alpha_4) + 2(2\lambda_R^2 - \mu^2 + 2V_z^2), \\ g_1 &= -3(\alpha_2 + \alpha_4)^2 + 4(-2\lambda_R^2 - V_z^2 + \mu^2)(\alpha_2 + \alpha_4) + 4\alpha_2(\lambda_R^2 + \mu^2) - 8V_z^2(\lambda_R^2 + \mu^2), \\ g_0 &= (\alpha_2 + \alpha_4)^3 - 2(\mu^2 - 2\lambda_R^2)(\alpha_2 + \alpha_4)^2 + 4(\alpha_2 + \alpha_4)[\alpha_2(-\lambda_R^2 - \mu^2) \\ &\quad - 2\lambda_R^2(\mu^2 - V_z^2 - \lambda_R^2)] + 8\alpha_2(\mu^4 - \lambda_R^4) + 8\alpha_4\lambda_R^2(\mu^2 - \lambda_R^2). \end{aligned} \quad (8.15)$$

当化学势为零的时候，方程 (8.15) 可以简化成

$$\begin{aligned} (\alpha_2 + \alpha_4 - \alpha_3)(4\alpha_3^2 + q_1\alpha_3 + q_2) &= 0, \\ q_1 &= -8(\alpha_2 + \alpha_4) - 16(\lambda_R^2 + V_z^2), \\ q_2 &= 4(\alpha_2 + \alpha_4)^2 + 16\lambda_R^2(\alpha_2 + \alpha_4) - 16\lambda_R^2\alpha_2 + 32\lambda_R^2V_z^2. \end{aligned} \quad (8.16)$$

由于 $4\alpha_3^2 + q_1\alpha_3 + q_2 = 0$ 与能隙闭合条件不一致，不可能成立，我们只能得到 $\alpha_2 + \alpha_4 - \alpha_3 = \alpha_1 = 0$ 。将这个条件代入方程 (8.14) 可以计算出能隙为 $E_{\text{gap}} = E_0(1 - |\Delta|/|V_z|)$ ，该能隙线性依赖于近邻引入的超导配对势强度，与数值结果非常吻合，如图 8-5 所示。特别地，当 $E_{\text{gap}} > |\Delta|$ ($E_{\text{gap}} > 10|\Delta|$) 的时候，对应 $|\Delta| < E_0|V_z|/(E_0 + |V_z|) \equiv \Delta_1$ ($|\Delta| < E_0|V_z|/(E_0 + 10|V_z|) \equiv \Delta_2 \approx 0.1E_0$)，这些条件可以指导实验去实现比较稳定的拓扑超导体和 Majorana 费米子。对于化学势非零的情况很难有严格的解析解。我们只给出了两个极限， $|\Delta| \sim \Delta_c$ 和 $\Delta \sim 0$ 。在 $|\Delta| \sim \Delta_c$ 极限下，能隙为 $E_{\text{gap}} = (\Delta_c - |\Delta|)\Delta_c^2|\mu^2 - \lambda_R^2|/\sqrt{V_z^2(\Delta_c^2 + \lambda_R^2)(\mu^4 + \lambda_R^2\Delta_c^2)}$ 。在 $\Delta \sim 0$ 极限下，能隙为 $E_{\text{gap}} = \sqrt{(E_0 - \mu)^2 - \Delta^2 w_2/w_1}$ (假设 $0 < \mu < E_0$)，其中 $w_1 = -\lambda_R^2\mu^2V_z^2 + \mu(\lambda_R^2 + V_z^2)(-\lambda_R^2 + \mu^2 - V_z^2)E_0$ ， $w_2 = \mu(\lambda_R^2 - \mu^2)(\lambda_R^2 + V_z^2)E_0 - 16\lambda_R^2V_z^2(\lambda_R^4 - \mu^2V_z^2 - 2\lambda_R^2\mu^2 + \lambda_R^2V_z^2)/(\lambda_R^2 + V_z^2)$ 。这两个极限下的解析结果跟数值结果都吻合得较好，见图 8-5。

8.2.4.2 Rashba 自旋轨道耦合和交换场对能隙的影响

我们再来研究一下 Rashba 自旋轨道耦合和交换场对基于量子反常霍尔态的拓扑超导体能隙的影响。如图 8-6 (a) 和 (b) 所示，分别给出了不同自旋轨道耦合强度和交换场下能隙随超导配对势强度的变化。这里化学势始终取为零。我们发现能隙随自旋轨道耦合强度或者交换场的增大而变大，这可以很容易通过上面得到的解析公式 $E_{\text{gap}} = E_0(1 - |\Delta|/|V_z|)$ 来理解，因为当自旋轨道耦合强度或交换场增大时 E_0 也随之变大。

8.2.5 基于量子反常霍尔态的拓扑超导体的实验方案

在本小节中，我们提出一个可能实现基于量子反常霍尔态的拓扑超导体的实验

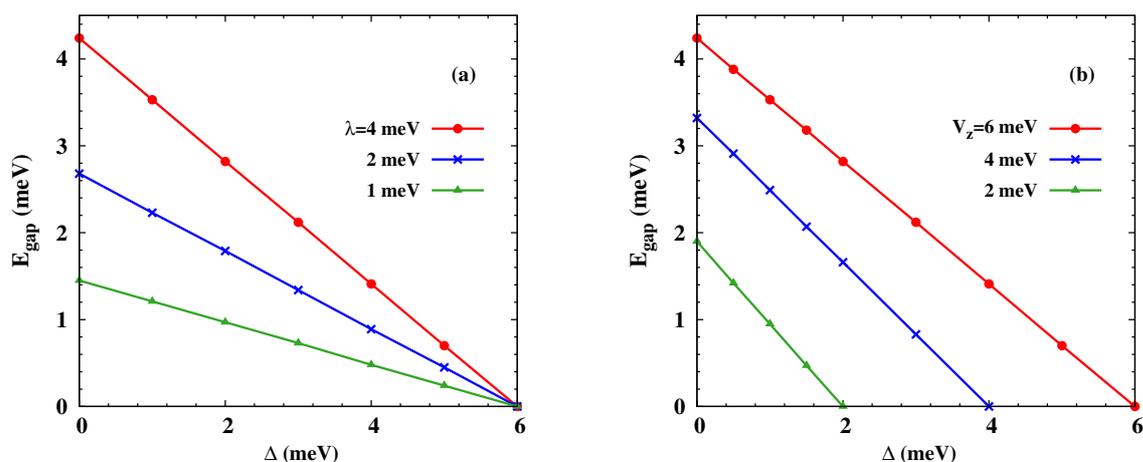


图 8-6: 基于量子反常霍尔态的拓扑超导体的能隙随近邻引入的超导配对势强度变化的数值结果。(a) 不同 Rashba 自旋轨道耦合强度的影响, $V_z = 6$ meV。(b) 不同交换场的影响, $\lambda = 4$ meV。这里化学势始终取为零。摘自文献 [328]。

方案。首先是要找到一个有较大能隙的量子反常霍尔绝缘体。将单层石墨烯长在一个反铁磁绝缘体 BiFeO_3 的 (111) 表面, 此时单层石墨烯中的交换场和 Rashba 自旋轨道耦合强度可以分别达到 $V_z = 142$ meV 和 $\lambda = 1.4$ meV, 从而实现一个能隙为 $2E_0 = 4.2$ meV 的量子反常霍尔绝缘体 [333]。然后将化学势调节到量子反常霍尔系统的能隙中, 即 $|\mu| < E_0$, 这在实验上可以通过观察量子化的霍尔电导来确定。最后就是把量子反常霍尔态贴到一个传统 s 波超导体表面, 比如 Nb (超导能隙 $\Delta_{\text{Nb}} = 0.83$ meV [313])。由于 $|\mu| < E_0 \ll |V_z|$ 和 $|\Delta| < |\Delta_{\text{Nb}}| \ll |V_z|$, 拓扑非平凡条件 $\Delta^2 + \mu^2 < V_z^2$ 满足, 此时系统为拓扑超导体。我们选取 $\Delta = 0.5$ meV 来估算拓扑超导体的能隙。当化学势分别为 0, 0.5, 1 meV 的时候, 相应的能隙为 2.05, 1.56, 1.06 meV, 换算成温度为 23.8, 18.1, 12.3 K。这些大的能隙 (在 10 K 的量级) 可以很好地保护 Majorana 费米子。

8.3 小结

单层石墨烯在 Rashba 自旋轨道耦合和交换场的共同作用下可以实现量子反常霍尔绝缘体。在本章中, 我们提出将 s 波超导配对通过近邻效应引入该量子反常霍尔绝缘体中可以实现一个二维拓扑超导体。在 Dirac 点附近非常低掺杂甚至零掺杂的时候, 该拓扑超导体可以有一个非常大的 Chern 数 $C_1 = 4$, 在边界处有四个 Majorana 费米子。更重要的是, 该拓扑超导体的能隙可能比近邻引入的超导配对势强度还大, 有的时候甚至可以大一个量级。这个非常独特的性质跟之前被广泛研究的有效 p 波超导体中的情况完全不同, 有效 p 波超导体的能隙始终比近邻引入的超导配对势强度小。总的来说, 我们在单层石墨烯中提出了一个基于量子反常霍尔态的拓扑超导体, 该拓扑超导体具有非常

大的 Chern 数和非常大的能隙，这为实现稳定的拓扑超导体和 Majorana 费米子提出了一个可能的方案。

第九章 硅量子点中的单三态弛豫

9.1 背景介绍

在第 1 章中我们讲过半导体量子点中基于自旋的量子比特是实现量子计算的一个很有力的候选 [53]。在这些量子点中，GaAs 量子点在过去的十几年中受到了极大的关注 [52, 54–65, 336, 337]。但是根据文献报道 GaAs 量子点中超精细相互作用 [338–347]、自旋轨道耦合 [44, 85] 以及散射 [60–62, 65] 等因素会限制体系的自旋去相干时间，我们知道较短的自旋去相干时间不利于自旋电子学器件的实现。最近，人们把目光转向自旋相干性质比 GaAs 好得多的硅材料 [68–73, 348, 349]。具体来说，在自然界的硅中超精细相互作用的强度要比 GaAs 的小两个量级 [350]，硅中超精细相互作用强度还可以在同位素提纯的作用下进一步减小 [351]。硅的体材料中具有中心反演对称性因而不存在 Dresselhaus 自旋轨道耦合，对于受限系统而言，界面反演对称性很有可能被破坏从而诱导出自旋轨道耦合 [352–354]，需要指出的是这个自旋轨道耦合跟 GaAs 中的相比仍然非常小。硅中没有压电相互作用使得电子-声子散射比 GaAs 中的弱很多 [71]。上面这些性质表明硅量子点中的自旋去相干时间可能非常长，这意味着硅量子点比 GaAs 量子点更有可能实现量子计算。除了具有非常好的自旋相干性质外，硅材料中的能带结构也很有特点。硅是一个具有非直接带隙的半导体，它的导带底是六重简并的，可以看成六个简并的能谷。这个简并可以被应力或者量子阱约束破坏成两部分，一个两重简并的子空间（能量较低）以及另一个四重简并的子空间（能量较高）。研究中一般关注能量较低的两个谷，界面的存在会进一步解除这两个谷的简并导致一个能量劈裂，我们将这个能量劈裂称为谷劈裂，谷劈裂的大小强烈依赖于量子阱的阱宽 [355, 356]。多个谷的存在使硅里面的物理变得更丰富。

最近，人们在硅量子点中提出了很多实现自旋量子比特的方案，这些方案可以简单总结为单电子的自旋两分量、两电子组成的自旋单三态以及三电子组成的自旋二四态 [68–75, 77, 78, 348, 349, 357, 358]。这些量子比特是在理想情况下提出来的，实际上在一些外在因素比如说自旋轨道耦合和散射的作用下，量子比特的两个能级之间可以发生跃迁从而使得这些能级具有一定的寿命 [74, 75, 77]，寿命越长越有利于量子比特的应用。据我们所知目前很少有人会在硅量子点里做这方面的研究 [68, 73–75, 77]。理论上，Raith 等人 [75] 研究了 Si/SiGe 单量子点以及侧向耦合的双量子点中单电子的自旋弛豫，自旋弛豫来源于自旋轨道耦合和电子-声学声子散射的共同作用。他们发现在单量子点中自旋弛豫率近似正比于磁场的七次方，跟实验结果吻合得较好，在双量子点

中自旋弛豫率对量子点的能谱结构非常敏感。定量上，他们计算得到的自旋弛豫率要比 GaAs 量子点中的小两个量级。Prada 等人 [68] 计算了硅量子点中的单三态弛豫，在没有外加磁场的时候，自旋弛豫的主要来源是超精细相互作用，但是在有磁场的时候，自旋轨道耦合在自旋弛豫中占据主导地位。需要指出的是在他们的计算中只考虑了能量最低的几个基函数，而这些基函数不一定能保证单三态弛豫时间的收敛 [61]，另外他们没有严格计算对量子点能级起着非常重要作用的电子-电子库仑相互作用。在实验上，Xiao 等人 [73] 测量了 Si/SiO₂ 量子点中的自旋弛豫时间，他们发现对单电子而言，自旋两分量之间的弛豫率近似跟磁场的七次方成正比，但是对两电子而言，在测量的磁场范围内自旋弛豫时间几乎不随磁场变化，目前实验上还无法确定测量到的自旋弛豫时间是哪个激发态（单态或者三态）的寿命。

我们自己也研究了硅单量子点 [74] 以及侧向耦合的双量子点 [77] 中的单三态自旋弛豫，自旋弛豫来源于自旋轨道耦合和电子-声子散射的共同作用。我们先用严格对角化的方法得到了量子点中电子的本征值和本征态，这里严格考虑了电子-电子库仑相互作用以及由界面引起的谷劈裂对能谱的影响。然后，我们利用费米黄金规则计算了单三态之间的弛豫率。在单量子点中，为了解释 Xiao 等人 [73] 的实验结果，我们先研究了平行磁场（磁场垂直于量子阱生长方向）的情况，发现最低单态的自旋寿命跟实验结果吻合得非常好。此外，我们在单三态弛豫率的磁场依赖关系中还预言了一个峰，这个峰是由单三态能级的反交叉引起的。在垂直磁场的情况中，我们发现单三态弛豫率可以通过改变磁场和量子点大小来进行有效调节。对于侧向耦合的双量子点来说，除了磁场和量子点大小外，量子点之间的距离也能很显著地改变单三态弛豫率。我们还发现单三态弛豫率对电场不敏感，这对自旋操控来说非常有意义因为在改变量子比特构型比如说从 (1, 1) 到 (2, 0) [(n, m) 中 n, m 分别表示左右量子点中的电子数] 的时候自旋寿命可以维持不变。最后需要强调的是无论是单量子点还是侧向耦合的双量子点中单三态能级的反交叉点附近的弛豫率都表现出非常有意思的行为即弛豫率在磁场、量子点大小或者点间距的依赖关系中呈现出峰或者谷。接下来我们将详细讨论一下这两个工作。

9.2 单量子点

9.2.1 模型和方法

先来看看单量子点的情况。在我们的模型中，侧向约束势为 $V_c(x, y) = \frac{1}{2}m_t\omega_0^2(x^2 + y^2)$ ，其中 m_t 和 ω_0 分别表示平面内有效质量和约束势频率 [359, 360]。该约束势对应的量子点大小可以表示为 $d_0 = \sqrt{\pi/m_t\omega_0}$ 。沿着量子阱生长方向即 [001] 方向，我们采用的是无限深势阱约束 $V_z(z)$ ，阱宽大小记为 $2a$ 。在外加磁场 $\mathbf{B} = B_\perp \hat{\mathbf{z}} + B_\parallel \hat{\mathbf{x}}$ 的作用下，单电子哈密顿量具有以下形式

$$H_e = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m_t} + \frac{P_z^2}{2m_z} + V(\mathbf{r}) + H_{\text{so}}(\mathbf{P}) + H_Z + H_v. \quad (9.1)$$

这里， m_z 表示沿着 z 方向的有效质量； $V(\mathbf{r}) = V_c + V_z$ ， $\mathbf{P} = -i\nabla + (e/c)\mathbf{A}$ ，其中 $\mathbf{A} = (-yB_\perp, xB_\perp, 2yB_\parallel)/2$ ； H_{so} 描述的是自旋轨道耦合哈密顿量包括了由结构反演对称破缺引起的 Rashba [44]项以及由界面反演对称破缺 (interface inversion asymmetry, IIA) 导致的自旋轨道耦合项（我们称之为 IIA 项） [352-354]，它的具体形式为

$$H_{\text{so}} = a_0(P_x\sigma_y - P_y\sigma_x) + b_0(-P_x\sigma_x + P_y\sigma_y), \quad (9.2)$$

其中 a_0 和 b_0 分别表示 Rashba 以及 IIA 项的强度； $H_Z = \frac{1}{2}g\mu_B(B_\perp\sigma_z + B_\parallel\sigma_x)$ 表示塞曼劈裂， g 表示 Landé 因子； H_v 是由界面引起的能量最低的两个能谷之间的耦合 [355, 356]，两个能谷位于 z 轴上的 $\pm\langle k_0 \rangle$ 处（我们分别用“ z ”和“ \bar{z} ”来标记处在 $\langle k_0 \rangle$ 和 $-\langle k_0 \rangle$ 的能谷）， $\langle k_0 \rangle = 0.85(2\pi/a_{\text{Si}})$ ， $a_{\text{Si}} = 5.43 \text{ \AA}$ 是硅块体材料的晶格常数，这里需要说明的是其它四个能谷能量很高因而没有考虑。

我们定义 $H_0 = \frac{1}{2m_t}(P_x^2 + P_y^2) + \frac{1}{2m_z}P_z^2 + V(\mathbf{r})$ ，通过求解该哈密顿量的 Schrödinger 方程可得本征值如下 [359, 360]

$$E_{nl n_z} = \Omega(2n + |l| + 1) + l\omega_B + \frac{n_z^2\pi^2}{8m_z a^2}, \quad (9.3)$$

$\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_B^2}$ ， $\omega_B = eB_\perp/(2m_t)$ 。这里， $n = 0, 1, 2, \dots$ 表示径向量子数， $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 代表角向量子数， n_z 是沿着量子阱生长方向的约束势产生的子带指标。相应的本征波函数可以写成

$$F_{nl n_z}(\mathbf{r}) = N_{n,l}(\alpha r)^{|l|} e^{-(\alpha r)^2/2} e^{il\theta} L_n^{|l|}[(\alpha r)^2] \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin[\frac{n_z\pi}{2a}(z+a)], & |z| \leq a \\ 0, & \text{其它情况,} \end{cases}$$

其中 $N_{n,l} = \{\alpha^2 n! / [\pi(n + |l|)!]\}^{1/2}$ ， $\alpha = \sqrt{m_t\Omega}$ ， $L_n^{|l|}$ 是广义的 Laguerre 多项式。不同能谷的波函数可以表示成 $\phi_{nl n_z}^{z, \bar{z}} = F_{nl n_z}(\mathbf{r}) e^{\pm ik_0 z} u_{z, \bar{z}}(\mathbf{r})$ ，其中 $u_{z, \bar{z}}(\mathbf{r})$ 是周期性函数 [70]。这里需要说明的是考虑到沿着量子阱生长方向的约束势很强，在计算中我们忽略了平行磁场的轨道效应。

我们可以证明不同能谷中波函数的交叠非常小，因此在我们的模型中只有 H_v 可以造成谷间耦合。目前为止，关于谷耦合还存在一些争议 [356, 361, 362]，我们采用了 Friesen 等人 [356] 的结果即 $\langle \phi_{nl n_z}^{z, \bar{z}} | H_v | \phi_{n'l' n_z}^{z, \bar{z}} \rangle = \Delta_{n_z}^1 \delta_{nn'} \delta_{ll'}$ ， $\langle \phi_{nl n_z}^{z, \bar{z}} | H_v | \phi_{n'l' n_z}^{z, \bar{z}} \rangle = \Delta_{n_z}^0 \delta_{nn'} \delta_{ll'}$ ，这里我们只给出了具有相同 n_z 的态之间的耦合，因为在我们的计算中只考虑了最低子带而其它子带由于能量太高都被忽略了。考虑进谷间耦合后，本征态变为 $\phi_{nl n_z}^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{nl n_z}^z \pm \phi_{nl n_z}^{\bar{z}})$ ，相应的本征值为 $E_{nl n_z}^\pm = E_{nl n_z} + \Delta_{n_z}^0 \pm |\Delta_{n_z}^1|$ ，其

中 $2|\Delta_{n_z}^1|$ 表示谷劈裂的大小。在上面的这些方程中，

$$\Delta_{n_z}^0 = \frac{V_v n_z^2 \pi^2}{4m_z a^3}, \quad (9.4)$$

$$\Delta_{n_z}^1 = \frac{V_v n_z^2 \pi^2 \cos(2k_0 a)}{4m_z a^3}, \quad (9.5)$$

V_v 是谷耦合强度跟量子阱阱深的比值 [356]，这里要指出的是 V_v 是跟量子阱阱深无关的常数，对无限深势阱的情况同样适用。

分析完单电子哈密顿量后，我们再来看看量子点中两电子总的哈密顿量，具体形式为

$$H_{\text{tot}} = (H_e^1 + H_e^2 + H_C) + H_p + H_{\text{ep}}^1 + H_{\text{ep}}^2. \quad (9.6)$$

这里，两个电子分别用“1”和“2”来表示。 $H_C = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\kappa|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$ 代表电子-电子库仑相互作用， κ 是相对静态介电常数； $H_p = \sum_{\mathbf{q}\lambda} \omega_{\mathbf{q}\lambda} a_{\mathbf{q}\lambda}^+ a_{\mathbf{q}\lambda}$ 描述的是声子哈密顿量， λ 和 \mathbf{q} 分别表示声子模以及动量；电子-声子相互作用哈密顿量可以写成 $H_{\text{ep}} = \sum_{\mathbf{q}\lambda} M_{\mathbf{q}\lambda} (a_{\mathbf{q}\lambda}^+ + a_{-\mathbf{q}\lambda}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ 。

为了求解两电子哈密顿量的本征值和本征态，我们构造了一组两电子的完备基，这些基函数是在单电子波函数的基础上得到的自旋单态和三态。具体来说，利用两个单电子空间波函数 $|n_1 l_1 n_{z1} n_{v1}\rangle$ 和 $|n_2 l_2 n_{z2} n_{v2}\rangle$ （分别缩记为 $|N_1\rangle$ 和 $|N_2\rangle$ ； $n_v = \pm$ ）可以得到自旋单态波函数

$$|S^{(\Xi)}\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \otimes \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}|N_1 N_2\rangle, & N_1 = N_2 \\ \frac{1}{2}(|N_1 N_2\rangle + |N_2 N_1\rangle), & N_1 \neq N_2, \end{cases} \quad (9.7)$$

以及自旋三态波函数 ($N_1 \neq N_2$)

$$|T_+^{(\Xi)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|N_1 N_2\rangle - |N_2 N_1\rangle) \otimes |\uparrow\uparrow\rangle, \quad (9.8)$$

$$|T_0^{(\Xi)}\rangle = \frac{1}{2}(|N_1 N_2\rangle - |N_2 N_1\rangle) \otimes (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (9.9)$$

$$|T_-^{(\Xi)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|N_1 N_2\rangle - |N_2 N_1\rangle) \otimes |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (9.10)$$

这里， $|NN'\rangle$ 中 N 和 N' 分别表示第一和第二个电子的空间波函数，上标 Ξ 代表每个态的谷构型，具体来说， $\Xi = \pm$ 对应 $n_{v1} = n_{v2} = \pm$ 而 $\Xi = m$ 表示 $n_{v1} \neq n_{v2}$ 的情况。

在这些两电子基函数下，我们计算了电子-电子库仑相互作用矩阵元，一般形式为

$$\begin{aligned} \langle N_1 N_2 | H_C | N'_1 N'_2 \rangle &= \frac{e^2}{16\pi^2 \epsilon_0 \kappa} \delta_{l_1+l_2, l'_1+l'_2} \sum_{\gamma_1, \gamma_2, \gamma'_1, \gamma'_2 = z, \bar{z}} \eta_{n_{v1}}^{\gamma_1} \eta_{n_{v2}}^{\gamma_2} \eta_{n'_{v1}}^{\gamma'_1} \eta_{n'_{v2}}^{\gamma'_2} \\ &\times \int_0^\infty dk_{\parallel} \int_{-\infty}^\infty dk_z k_{\parallel} P_{n_1 l_1}^{n'_1 l'_1}(k_{\parallel}) P_{n_2 l_2}^{n'_2 l'_2}(k_{\parallel}) \frac{W_{n_z 1 \gamma_1}^{n'_z 1 \gamma'_1}(k_z) (W_{n_z 2 \gamma_2}^{n'_z 2 \gamma'_2}(k_z))^*}{k^2}, \end{aligned} \quad (9.11)$$

$$\begin{aligned} P_{nl}^{n'l'}(k_{\parallel}) &= \sqrt{\frac{n!n'!}{(n+|l|)!(n'+|l'|)!}} e^{-\frac{k_{\parallel}^2}{4\alpha^2}} \sum_{i=0}^{n'} \sum_{j=0}^n C_{n',|l'|}^i C_{n,|l|}^j \bar{n}! \\ &\times L_{\bar{n}}^{|l-l'|} \left(\frac{k_{\parallel}^2}{4\alpha^2} \right) \left[\text{sgn}(l'-l) \frac{k_{\parallel}}{2\alpha} \right]^{|l'-l|}, \end{aligned} \quad (9.12)$$

$$W_{n_z \gamma}^{n'_z \gamma'} = \langle n_z, \gamma | e^{ik_z z} | n'_z, \gamma' \rangle, \quad (9.13)$$

其中 $\eta_{\pm}^z = 1$, $\eta_{\mp}^{\bar{z}} = -\eta_{\pm}^z = 1$, $C_{n,l}^i = \frac{(-1)^i}{i!} \binom{n+l}{n-i}$, $\bar{n} = i+j+(|l|+|l'|-|l'-l|)/2$, $\text{sgn}(x)$ 表示符号函数。我们还计算了两电子基函数下的自旋轨道耦合和塞曼劈裂项从而得到两电子总的哈密顿量的矩阵元，通过严格对角化该哈密顿量矩阵可以得到本征值和本征态。这里需要说明的是如果两电子本征态中单态（三态）的成分超过 50%，我们仍然称之为单态（三态）。

有了本征值和本征态后，我们就可以利用费米黄金规则来计算由电子-声子散射引起的不同本征态之间的跃迁几率，具体形式为

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f} &= 2\pi \sum_{\mathbf{q}\lambda} |M_{\mathbf{q}\lambda}|^2 |\langle f | \chi | i \rangle|^2 [\bar{n}_{\mathbf{q}\lambda} \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \omega_{\mathbf{q}\lambda}) \\ &+ (\bar{n}_{\mathbf{q}\lambda} + 1) \delta(\epsilon_f - \epsilon_i + \omega_{\mathbf{q}\lambda})]. \end{aligned} \quad (9.14)$$

这里， $|i\rangle$ 和 $|f\rangle$ 分别表示初态和末态， $\chi(\mathbf{q}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2}$, $\bar{n}_{\mathbf{q}\lambda}$ 是声子数目，在我们的计算中 $\bar{n}_{\mathbf{q}\lambda} = 0$ 因为温度被固定为 0 K，此时只有声子发射过程起作用。

9.2.2 数值结果

在我们的计算中， $m_t = 0.19m_0$, $m_z = 0.98m_0$ ，其中 m_0 表示自由电子质量 [363]；Landé 因子 $g = 2$ [364]， $V_v = 7.2 \times 10^{-11} \text{ m}$ [356]，相对静态介电常数 $\kappa = 7.9$ (Si/SiO₂ 量子点) [71]， $\kappa = 11.9$ (SiGe/Si/SiGe 量子点) [365]。对于散射项而言，我们只需要考虑由形变势引起的谷内电子-声学声子散射，因为只有声学声子的能量才能跟电子的初末态能量之差匹配起来。散射矩阵元为 $M_{\beta, \text{intra}, \mathbf{Q}}^2 = D_{\beta}^2 Q^2 / (2d\Omega_{\beta, \text{intra}, \mathbf{Q}})$ ， $\beta = \text{LA}/\text{TA}$ 表示纵向/横向声学声子模，硅的质量密度 $d = 2.33 \text{ g/cm}^3$ [366]，LA 和 TA 声子的形变势分别为 $D_{\text{LA}} = 6.39 \text{ eV}$ 以及 $D_{\text{TA}} = 3.01 \text{ eV}$ [367]，声子能量 $\Omega_{\beta, \text{intra}, \mathbf{Q}} = v_{\beta} Q$ ，其中声速 $v_{\text{LA}} = 9.01 \times 10^5 \text{ cm/s}$ ， $v_{\text{TA}} = 5.23 \times 10^5 \text{ cm/s}$ [367]。有了这些参数后，我们先用严格对角化的方法得到了体系的本征值和本征态，然后用费

米黄金规则计算了单三态之间的跃迁几率。需要指出的是为了确保本征值和跃迁几率的收敛我们考虑了能量最低的 1516 个单态和 4452 个三态基函数。

我们发现体系的本征态可以根据谷指标分成三部分即 $\Xi = +, -, m$ ，每部分之间几乎是独立的。一方面，它们之间的耦合非常弱，这是因为不同谷的波函数交叠很小，谷间库仑相互作用几乎可以忽略，还有在只考虑最低子带的时候不同谷之间的自旋轨道耦合矩阵元严格为零。另一方面，三部分之间的跃迁几乎是被禁戒的，因为 $\langle f|\chi|i\rangle$ [参见公式 (9.14)] 在谷间波矢 $\langle 2k_0\rangle$ 很大的时候会被非常强烈地压制。这种分类方式还可以应用到两电子基函数中去，我们将基函数分成三个独立的子空间，这样计算得到的本征态就自然而然地分成了三部分。

9.2.2.1 平行磁场依赖以及跟实验结果的比较

最近，Xiao 等人 [73] 测量了 Si/SiO₂ 量子点中两电子自旋弛豫时间对平行于异质结界面的磁场的依赖关系。他们发现当磁场从 2 T 增大到 4.5 T 的时候弛豫时间在 5 ms 左右几乎不随磁场变化。实验上不能确定测到的弛豫时间对应的弛豫过程，因为不清楚准确的激发态能级。为了解释实验上测到的弛豫时间的磁场依赖关系以及搞清楚具体的弛豫过程，我们利用我们的模型来跟实验做一个详细的比较。我们模型中要用到的参数有量子点大小、量子阱宽大小以及自旋轨道耦合强度，需要指出的是谷劈裂大小不是一个独立的参数，它是由量子阱宽决定的 [参见公式 (9.5)]。在实验中，测量到的轨道能量间隔为 ~ 0.4 meV，对应量子点大小为 $d_0 = 56$ nm。但是，实验中没有给出跟阱宽大小和自旋轨道耦合强度直接相关的信息。我们先来分析一下量子阱宽对体系的影响，它决定了子带能量和谷劈裂，实验上测量的弛豫过程对应的是能量最低的几个态，这些态一般而言都处于最低子带，它们之间的能量间隔跟阱宽无关，另外这些能发生跃迁的几个态必然具有相同的谷指标（这在前面已经讲过），这意味着这些态之间的能量差跟谷劈裂也没有关系。总的来说，发生弛豫的几个态的能量差跟阱宽无关，这表明跃迁几率很有可能对阱宽不敏感 [参见公式 (9.14)]。基于以上分析，我们不妨选取阱宽为 $2a = 4.344$ nm（对应 32 层硅原子），相应的谷劈裂为 $2|\Delta_{n_z}^1| = 0.83$ meV，此时谷劈裂较大因而最低的几个能级的谷指标都为“-”。Rashba 自旋轨道耦合和 IIA 项的强度只能通过拟合实验结果得到，另外在计算中，我们假设磁场沿着 x 方向。

我们先计算了体系的能谱，需要强调的是它对自旋轨道耦合强度很不敏感。在图 9-1 (a) 中，我们给出了最低的几个能级 $|S^{(-)}\rangle$ 、 $|T_0^{(-)}\rangle$ 以及 $|^iT_{-}^{(-)}\rangle$ ($i = 1-6$) 随平行磁场的变化。随着磁场的增加， $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_0^{(-)}\rangle$ 的能量几乎保持不变而 $|^iT_{-}^{(-)}\rangle$ ($i = 1-6$) 的能量线性减小，这是由塞曼劈裂决定的。为了后面比较方便地理解弛豫率的行为，我们给出了各个态的主要成分。 $|S^{(-)}\rangle$ 的主要成分是由单电子态 $|01\rangle|0-1\rangle$ 构成的， $|^4T_{-}^{(-)}\rangle$ 和 $|^5T_{-}^{(-)}\rangle$ 的主要成分分别为 $|01\rangle|0-1\rangle$ 和 $|00\rangle|10\rangle$ 。其它的几个态 $|^iT_{-}^{(-)}\rangle$ ($i = 1, 2, 3, 6$) 和 $|T_0^{(-)}\rangle$ 各自都是两重简并的， $|^1T_{-}^{(-)}\rangle$ 、 $|^2T_{-}^{(-)}\rangle$ 、 $|^3T_{-}^{(-)}\rangle$ 和 $|^6T_{-}^{(-)}\rangle$ 的主要成分分别为 $|00\rangle|0\pm 1\rangle$ 、 $|0\pm 1\rangle|0\pm$

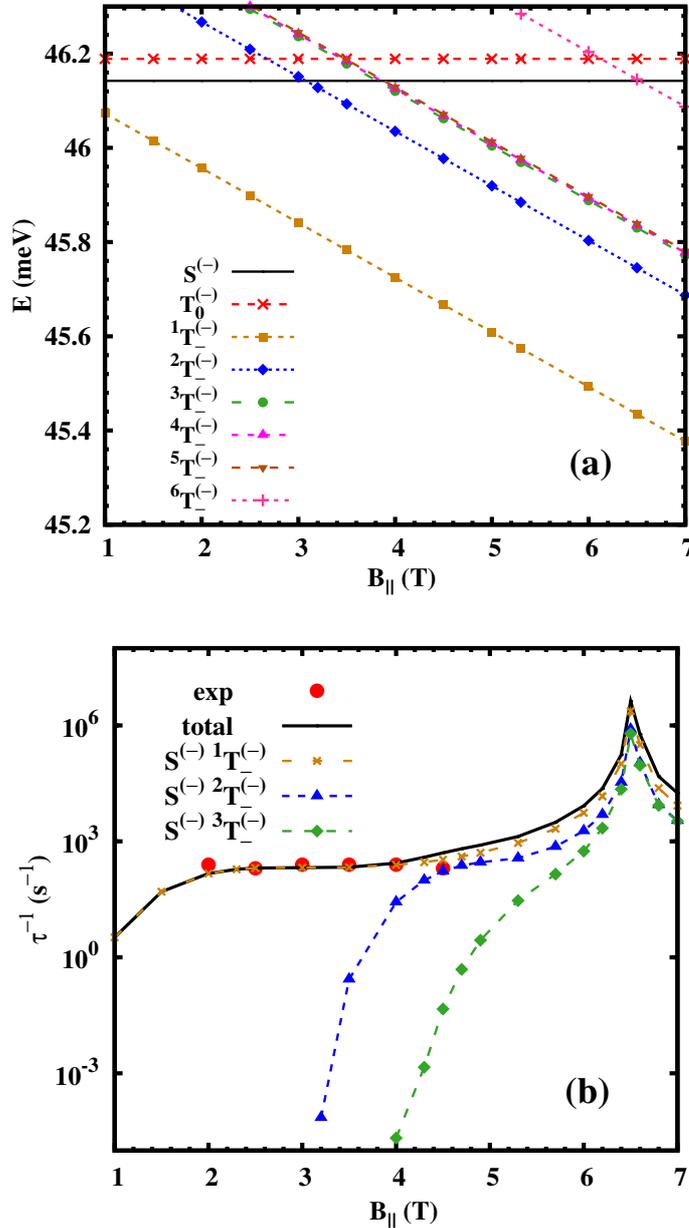


图 9-1: (a) 硅单量子点中最低的几个能级随平行磁场 B_{\parallel} 的变化。需要指出的是 $|T_0^{(-)}\rangle$ 和 $|iT_0^{(-)}\rangle$ ($i = 1, 2, 3, 6$) 各自都是两重简并的; (b) 弛豫率随平行磁场的变化。红色的点表示实验结果而黑色实线表示的是利用我们模型计算得到的 $|S^{(-)}\rangle$ 的总的跃迁几率。 $S^{(-)} \rightarrow iT_0^{(-)}$ ($i = 1-3$) 代表 $|S^{(-)}\rangle$ 到两个简并的 $|iT_0^{(-)}\rangle$ 能级的跃迁几率之和。在计算中, 阱宽 $2a = 4.344$ nm, 量子点大小 $d_0 = 56$ nm。摘自文献 [74]。

2)、 $|00\rangle|0\pm 2\rangle$ 以及 $|10\rangle|1\pm 1\rangle$ 而 $|T_0^{(-)}\rangle$ 的主要成分跟 $|^1T_1^{(-)}\rangle$ 的一样。这里，我们只保留了径向和角向量子数，因为这些态中的其它量子数都一样。

有了这些本征值和本征态后，我们利用费米黄金规则计算了这些态之间的跃迁几率，这里只需要考虑声子发射过程，因为我们采用了零温近似，这跟实验中温度很低的条件是一致的 [73]。我们发现当 Rashba 自旋轨道耦合强度 $a_0 = -2.09 \text{ m/s}$ 以及 IIA 项强度 $b_0 = -10.44 \text{ m/s}$ 的时候，计算得到的 $|S^{(-)}\rangle$ 的总的驰豫率跟实验结果非常一致如图 9-1 (b) 所示（磁场从 2 T 到 4.5 T），其中红色的点和黑色实线分别表示实验数据和我们的数值结果。需要指出的是其它能级的驰豫率跟实验结果很不一样，具体来说， $|T_0^{(-)}\rangle$ 的驰豫率在 $B_{\parallel} \sim 3.45 \text{ T}$ 时会出现一个峰（没有在图中给出），而 $|^i T_1^{(-)}\rangle$ ($i = 2-6$) 驰豫得太快了，驰豫时间在 $\sim 1 \text{ ns}$ 量级，要远小于实验上测量的驰豫时间。因此，我们认为实验上测到的驰豫时间对应的是 $|S^{(-)}\rangle$ 的寿命。当磁场进一步变大后（大于 4.5 T），我们发现驰豫率在 $B_{\parallel} \sim 6.5 \text{ T}$ 处出现了一个峰，我们预言的这个峰有待实验进行检验。另外，当磁场小于 2 T 的时候，随着磁场的变大，驰豫率呈现明显上升的趋势。接下来我们具体分析一下这些磁场依赖关系。为了辅助理解，我们在图 9-1 (b) 中给出了 $|S^{(-)}\rangle$ 的三个主要驰豫通道（包括 $S^{(-)} \rightarrow ^i T_1^{(-)}$, $i = 1-3$ ）的驰豫率随磁场的变化。我们发现从 $|S^{(-)}\rangle$ 到 $|^1 T_1^{(-)}\rangle$ 的驰豫通道占据主导地位。在小磁场区域（小于 2 T），声子的能量（ $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|^1 T_1^{(-)}\rangle$ 之间的能量差）比较小，它随磁场的增加而线性变大使得跃迁几率明显增强 [61, 65]。当磁场进一步变大后（大于 2 T）， $\langle f|\chi|i\rangle$ 会随磁场的增大而减小从而使得驰豫率变小，这会压制驰豫率随声子能量变大而增大的趋势，最终驰豫率表现出对磁场不敏感的行为。在磁场远离峰值的时候，类似的分析同样适用于另外两个驰豫通道即从 $|S^{(-)}\rangle$ 到 $|^i T_1^{(-)}\rangle$ ($i = 2, 3$)。再来看一下驰豫率出现峰的原因。从能谱上来看，在 $B_{\parallel} \sim 6.5 \text{ T}$ 的时候， $|^6 T_1^{(-)}\rangle$ 和 $|S^{(-)}\rangle$ 的能级相交在一起，相交点对应的是一个反交叉点，这是自旋轨道耦合引起的。为了方便讨论，我们将总的角向量子数和自旋态分别记为 $L = l_1 + l_2$ 和 (S, S_x) ，其中 S_x 表示总自旋 \mathbf{S} 在 x 方向上的分量。自旋轨道耦合哈密顿量可以写成以下形式

$$H_{\text{so}} = [a_0(P^+ + P^-) - ib_0(P^+ - P^-)](S^+ + S^-), \quad (9.15)$$

这里 $P^{\pm} = P_x \pm iP_y$, $S^{\pm} = S_y \pm iS_z$ ，升降算符 P^{\pm} 和 S^{\pm} 可以分别使 L 和 S_x 改变 1，需要说明的是我们将自旋轨道耦合项中关于 σ_x 的项去掉了，因为它们起着类似塞曼劈裂的作用不会对自旋翻转有贡献。从新的自旋轨道耦合哈密顿量出发可知两电子态 (L, S_x) 能够跟 $(L \pm 1, S_x \pm 1)$ 以及 $(L \pm 1, S_x \mp 1)$ 耦合在一起。 $|^6 T_1^{(-)}\rangle$ 和 $|S^{(-)}\rangle$ 主要成分的量子数 (L, S_x) 分别为 $(\pm 1, -1)$ 和 $(0, 0)$ ，很明显， $|^6 T_1^{(-)}\rangle$ 和 $|S^{(-)}\rangle$ 可以通过自旋轨道耦合直接耦合在一起。因此，在 $|^6 T_1^{(-)}\rangle$ 和 $|S^{(-)}\rangle$ 的能级交叉点处会打开一个能隙（太小了没有在图中给出），我们将这样的交叉点称为反交叉点。在反交叉点附近， $|S^{(-)}\rangle$ 中自旋向下的三态成分会被极大地加强，从而使得驰豫率呈现出一个峰。我们注意到 $|^2 T_1^{(-)}\rangle$ 和 $|S^{(-)}\rangle$ 的能级相交处也是一个反交叉点，但是它们之间的耦合是间

接的因而比较小，对单三态弛豫的影响很微弱。 $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|^iT_0^{(-)}\rangle$ ($i = 3-5$) 的能级相交处是简单的交叉点。此外，我们前面提到过 $|T_0^{(-)}\rangle$ 的弛豫率在 $B_{\parallel} \sim 3.45$ T 处也会出现一个峰，这反映了 $|T_0^{(-)}\rangle$ 和 $|^iT_0^{(-)}\rangle$ ($i = 3-5$) 之间的反交叉行为。对于 $|^iT_0^{(-)}\rangle$ ($i = 2-6$) 而言，弛豫非常快的原因在于初末态自旋构型相同，不会受限于自旋轨道耦合。在上面的计算中我们固定了阱宽以及谷劈裂的大小，当我们改变阱宽和/或谷劈裂的时候发现上面的结果除了能量有个整体平移外几乎不受影响。

类似地，我们还计算了谷构型为“+”的子空间中的弛豫率，发现 $|S^{(+)}\rangle$ 的总弛豫率也能跟实验结果吻合得很好，其中 $|S^{(+)}\rangle$ 到 $|^1T_0^{(+)}\rangle$ 的跃迁占据主导地位。这里， $|S^{(+)}\rangle$ 和 $|^1T_0^{(+)}\rangle$ 分别是谷构型为“+”的子空间中能量最低的单态和三态。对于谷构型为“m”的情况，会有更多的单三态参与进来，这使得结果会比谷构型为“±”的复杂很多，我们没有对这部分进行深入研究。

9.2.2.2 垂直磁场依赖

在本小节中，我们来研究一下 SiGe/Si/SiGe 量子点中垂直磁场对体系能谱和弛豫率的影响，需要说明的是 SiGe/Si/SiGe 量子点跟 Si/SiO₂ 量子点在模型上没有区别，唯一不同的是材料参数比如说相对静态介电常数。量子阱阱宽和谷劈裂的选择跟平行磁场中的一样。在沿着量子阱生长方向施加一个 30 kV/cm 的电场后可以得到 Rashba 自旋轨道耦合和 IIA 项的强度分别为 $a_0 = \mp 6.06$ m/s 和 $b_0 = \mp 30.31$ m/s，只有谷指标相同的态之间才有自旋轨道耦合矩阵元，当谷指标为“+ (-)”的时候，自旋轨道耦合强度相应地取 + (-) [354]。量子点大小选取为 $d_0 = 29$ nm，这么大的量子点可以确保最低的单三态都在谷构型为“-”的子空间中。

在图 9-2 (a) 中，我们给出了量子点中最低的四个能级随垂直磁场的变化，这四个态被标记为 $|S^{(-)}\rangle$ 、 $|T_+^{(-)}\rangle$ 、 $|T_0^{(-)}\rangle$ 以及 $|T_-^{(-)}\rangle$ 。能谱的形状可以通过单电子的能级来理解。 $|S^{(-)}\rangle$ 的主要成分为 $|S^1{}^{(-)}\rangle$ ，它是由两个相同的单电子态 $|001-\rangle$ 组成的，因此 $\epsilon_{S^{(-)}}$ 的磁场依赖关系近似由 $2E_{001}^-$ 给出，从公式 (9.3) 可知， E_{001}^- 随磁场的增加而变大。类似地， $|T_0^{(-)}\rangle$ ($|T_{\pm}^{(-)}\rangle$) 的磁场依赖关系可以由 $E_{001}^- + E_{0-11}^-$ ($E_{001}^- + E_{0-11}^- \pm E_Z$ ， E_Z 表示塞曼劈裂) 来描述。需要指出的是上面对磁场依赖的定性分析在库仑相互作用比较强的时候仍然适用。随着磁场的变大，我们发现 $|S^{(-)}\rangle$ 的能级会依次跟三个三态的能级相交，这些相交点是交叉还是反交叉取决于这些态能不能通过自旋轨道耦合联系起来。为了方便讨论，我们将总的角向量子数和自旋态分别记为 $L = l_1 + l_2$ 和 (S, S_z) ，其中 S_z 表示总自旋 \mathbf{S} 在 z 方向上的分量。自旋轨道耦合哈密顿量可以重新写成以下形式

$$H_{so} = 2ia_0(P^+S^- - P^-S^+) - 2b_0(P^+S^+ + P^-S^-), \quad (9.16)$$

$S^{\pm} = S_x \pm iS_y$ ，升降算符 P^{\pm} 和 S^{\pm} 可以分别使 L 和 S_z 改变 1。很容易看出两电子态 (L, S_z) 既可以通过 Rashba 自旋轨道耦合跟 $(L \pm 1, S_z \mp 1)$ 耦合在一起又可以借

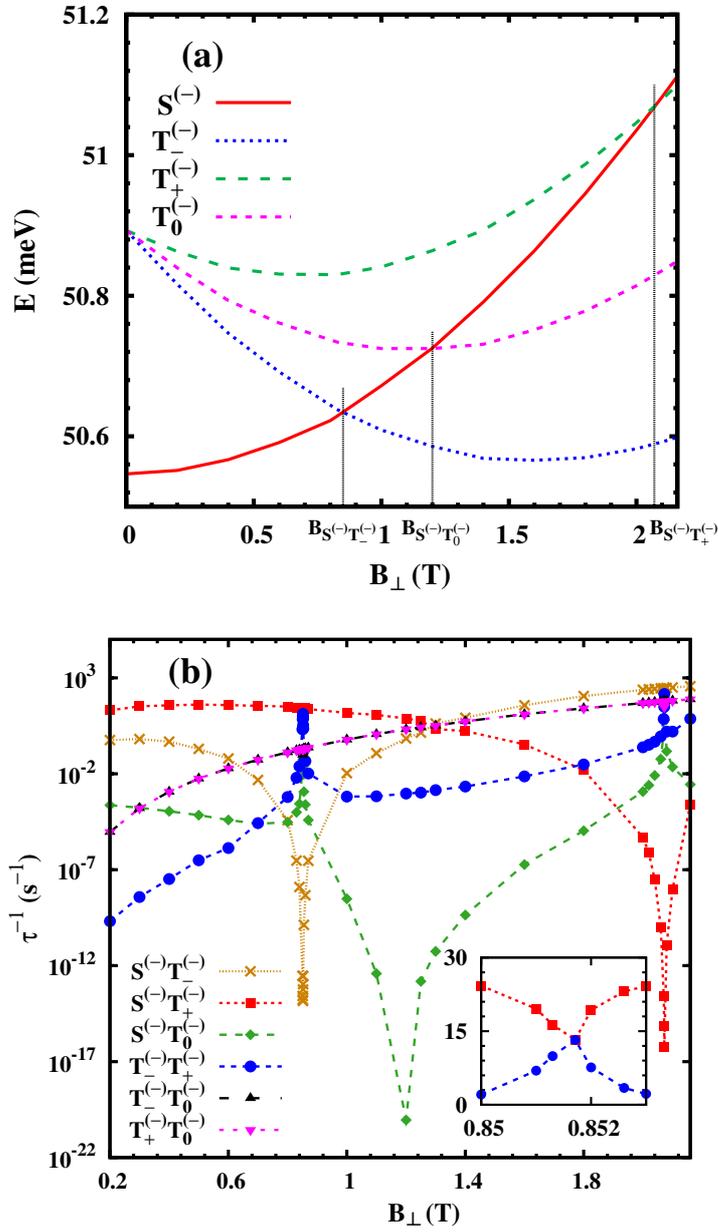


图 9-2: (a) 硅单量子点中最低的四个能级随垂直磁场 B_{\perp} 的变化。交叉或者反交叉点对应的磁场记为 $B_{S^{(-)}T_1^{(-)}}$, $B_{S^{(-)}T_0^{(-)}}$ 和 $B_{S^{(-)}T_0^{+}}$; (b) 弛豫率随垂直磁场的变化。插图中放大了 $B_{S^{(-)}T_1^{(-)}}$ 附近 $S^{(-)}T_0^{+}$ 和 $T_1^{(-)}T_0^{+}$ 的弛豫率。在计算中, 阱宽 $2a = 4.344 \text{ nm}$, 量子点大小 $d_0 = 29 \text{ nm}$ 。摘自文献 [74]。

助 IIA 项跟 $(L \pm 1, S_z \pm 1)$ 耦合起来。 $|T_-^{(-)}$ 和 $|S^{(-)}$ 的主要成分的量子数 (L, S_z) 分别为 $(-1, -1)$ 和 $(0, 0)$ ，很明显，IIA 项可以将这两个态耦合起来，它们之间的相交点 ($B_{S^{(-)}T_-^{(-)}} \sim 0.85$ T) 为反交叉点，能隙大小约为 $0.2 \mu\text{eV}$ 。类似地，Rashba 自旋轨道耦合使得 $|S^{(-)}$ 和 $|T_+^{(-)}$ 之间的相交点 ($B_{S^{(-)}T_+^{(-)}} \sim 2.07$ T) 变成反交叉点。而 $|S^{(-)}$ 和 $|T_0^{(-)}$ 的相交点 ($B_{S^{(-)}T_0^{(-)}} \sim 1.2$ T) 就是一个简单的交叉点。

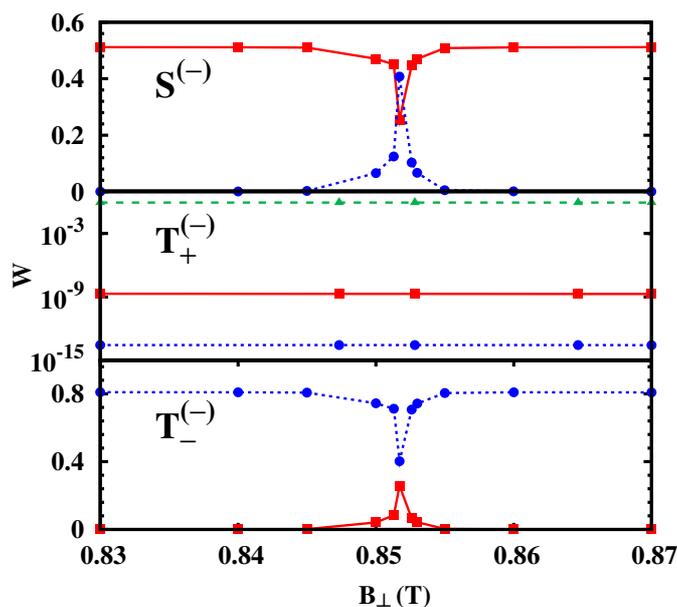


图 9-3: 硅单量子点中本征态的主要成分的权重 $W = |\langle \xi_0 | \xi \rangle|^2$ 在反交叉点 $B_{S^{(-)}T_-^{(-)}}$ 附近随垂直磁场的变化。本征态 $|\xi\rangle = |S^{(-)}\rangle$ 、 $|T_+^{(-)}\rangle$ 和 $|T_-^{(-)}\rangle$ ，主要成分包括 $|\xi_0\rangle = |S^{1(-)}\rangle$ (红色实线)、 $|T_+^{1(-)}\rangle$ (绿色短划线) 以及 $|T_-^{1(-)}\rangle$ (蓝色点线)。摘自文献 [74]。

在图 9-2 (b) 中，我们给出了单态和三个三态之间所有弛豫通道的跃迁几率，可以看出激发态的寿命非常长，要比 GaAs 量子点中的单三态弛豫时间大四个量级左右 [61]。我们发现在交叉和反交叉点附近，跃迁几率表现出非常有意思的行为。在反交叉点 $B_{S^{(-)}T_-^{(-)}}$ 附近，所有的跃迁几率（除了 $|T_+^{(-)}\rangle$ 和 $|T_0^{(-)}\rangle$ 之间的）呈现出一个峰或者谷。 $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_-^{(-)}\rangle$ 之间的弛豫率的迅速减小来源于声子能量的减小 [61, 65]。为了理解其它通道的行为，我们在图 9-3 中给出了反交叉点附近本征态中几个主要成分的权重随磁场的变化，其中红色实线、蓝色点线和绿色短划线分别表示主要成分 $|S^{1(-)}\rangle$ 、 $|T_-^{1(-)}\rangle$ 以及 $|T_+^{1(-)}\rangle$ 。我们发现当磁场接近反交叉点的时候， $|T_+^{(-)}\rangle$ 中的成分几乎保持不变， $|T_0^{(-)}\rangle$ 具有类似的行为（没有在图中给出），但是 $|S^{(-)}\rangle$ 中 $|S^{1(-)}\rangle$ ($|T_-^{1(-)}\rangle$) 的权重明显减小（变大）。对于 $|T_+^{(-)}\rangle$ 和 $|S^{(-)}\rangle$ 之间的跃迁而言， $|S^{1(-)}\rangle$ 的通道占据主导地位，它使得弛豫率在反交叉点附近呈现出一个谷的行为。跟 $|S^{(-)}\rangle$ 相比， $|T_-^{(-)}\rangle$ 中的主要成分表现出完全相反的变化，因此 $|T_+^{(-)}\rangle$ 和 $|T_-^{(-)}\rangle$ 之间的弛豫率在 $B_{S^{(-)}T_-^{(-)}}$ 处达到最大。其它几个通道的弛豫率的行为

为可以做同样的分析。在反交叉点 $B_{S^{(-)}T_+^{(-)}}$ 附近，物理很类似，所有的跃迁几率（除了 $|T_0^{(-)}\rangle$ 和 $|T_-^{(-)}\rangle$ 之间的）呈现出一个峰或者谷。在交叉点 $B_{S^{(-)}T_0^{(-)}}$ 附近，物理跟前面反交叉点的情况很不一样，只有 $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_0^{(-)}\rangle$ 之间的跃迁几率表现出一个谷的行为而其它的弛豫率没有明显的变化，原因在于 $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_0^{(-)}\rangle$ 之间没有耦合，所有态的成分在交叉点附近几乎不变。远离反交叉点时跃迁几率的变化可以通过跃迁几率对声子能量的依赖关系来理解，这在平行磁场的情况中已经讨论过了。

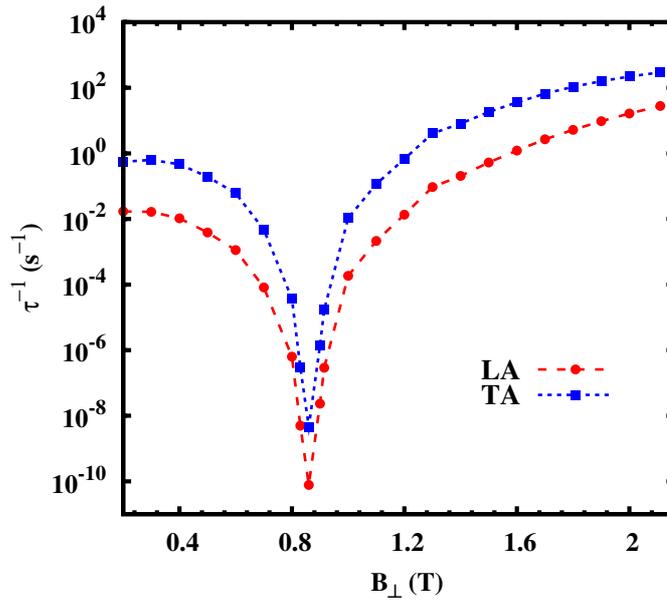


图 9-4: 硅单量子点中 $|T_-^{(-)}\rangle$ 和 $|S^{(-)}\rangle$ 之间的跃迁几率中 LA 和 TA 声子模的贡献，红色短划线和蓝色点线分别表示 LA 和 TA 声子模。这里， $2a = 4.344 \text{ nm}$ ， $d_0 = 29 \text{ nm}$ 。摘自文献 [74]。

我们还比较了纵向（LA）和横向（TA）声学声子模在单三态弛豫过程中的相对重要性。图 9-4 中，我们给出了只有纵向或者横向声学声子时 $|T_-^{(-)}\rangle$ 和 $|S^{(-)}\rangle$ 之间的弛豫率随垂直磁场的变化。可以看出横向声学声子模导致的弛豫率始终比纵向声学声子的来得大，原因在于两支声子的声速不同，LA 声子的声速是 TA 声子的两倍左右 [367]，这会使得 LA 声子的动量比 TA 的来得小。因此，LA 声子模对弛豫的贡献要小于 TA 声子 [参见公式 (9.14)]。需要指出的是其它弛豫通道中也有类似的行为。

除了弛豫率对磁场的依赖外，我们研究了垂直磁场下量子点大小对弛豫率的影响，数值结果如图 9-5 所示。我们发现跃迁几率的行为跟改变垂直磁场时的情况很类似，这里单态跟 $|T_-^{(-)}\rangle$ 在量子点大小为 $d_0 \sim 27.4 \text{ nm}$ 的时候有一个反交叉点。由此可见，通过改变量子点大小也可以有效地调节单三态弛豫，在实验中量子点大小可以利用电学方法来操控 [69]。

最后，我们来讨论一下谷劈裂比较小的情况，当量子阱宽为 27 个硅原子层的时候谷劈裂为 $2|\Delta_{n_z}^1| = 0.35 \text{ meV}$ 。我们发现在量子点大小为 18 nm 以及外加磁场较小的时候最低的三态为 $|T_-^{(m)}\rangle$ 、 $|T_0^{(m)}\rangle$ 以及 $|T_+^{(m)}\rangle$ ，它们的主要成分是由单电子

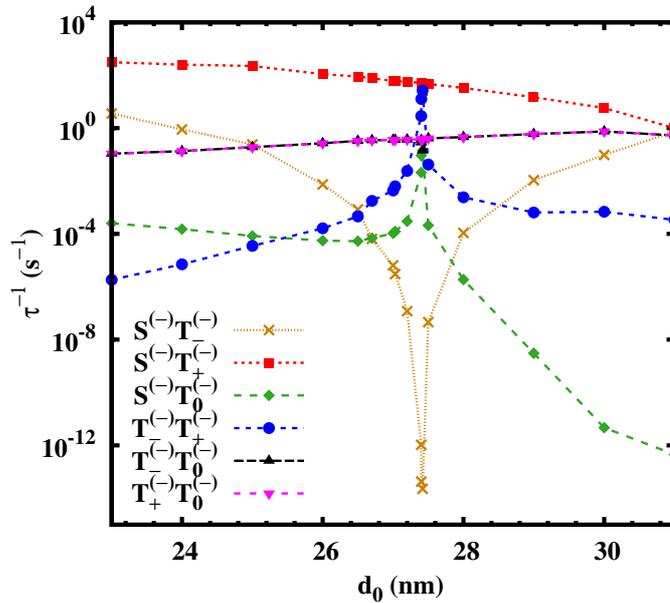


图 9-5: 硅单量子点中弛豫率随量子点大小 d_0 的变化。在计算中, $2a = 4.344$ nm, $B_{\perp} = 1$ T。摘自文献 [74]。

波函数 $|001-\rangle$ 和 $|001+\rangle$ 构成的, 跟之前讨论的大谷劈裂的情况不同。最低的单态为 $|S^{(-)}\rangle$, 这跟大谷劈裂的情况是一样的。有意思的是, 能量次低的单态为 $|S^{*(m)}\rangle$, 它跟 $|T_0^{(m)}\rangle$ 几乎简并, 主要成分也是由单电子波函数 $|001-\rangle$ 和 $|001+\rangle$ 构成的。这两个态的简并反映了谷间交换库仑相互作用非常小 [71]。在上面提及的这些态中不会出现反交叉点, 因为在只考虑最低子带的时候不同谷之间的自旋轨道耦合矩阵元严格为零, 这意味着弛豫率的磁场和量子点依赖中不会出现大谷劈裂时峰和谷的行为。另外, 我们发现三态跟 $|S^{(-)}\rangle$ 之间的跃迁几率要远小于大谷劈裂的情况, 这是因为这些三态和 $|S^{(-)}\rangle$ 的谷构型不同, 属于不同的子空间, 这在前面已经讨论过了。

9.3 双量子点

9.3.1 模型和方法

再来看看双量子点的情况。在我们的模型中, 侧向约束势的形式为 $V_c(x, y) = \frac{1}{2}m_t\omega_0^2\{\min[(x-x_0)^2, (x+x_0)^2] + y^2\}$ 。在图 9-6 中我们给出了双量子点的示意图, 两个点的位置在 $\mathbf{R}_{R,L} = (\pm x_0, 0, 0)$ 处, $2x_0$ 表示左 (L) 右 (R) 两个量子点之间的距离。沿着量子阱生长方向即 $[001]$ 方向, 我们采用的是无限深势阱约束 $V_z(z)$ 。在外加磁场 $\mathbf{B} = B_{\perp}\hat{\mathbf{z}} + B_{\parallel}\hat{\mathbf{x}}$ 的作用下, 单电子哈密顿量可以写成

$$H_e = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m_t} + \frac{P_z^2}{2m_z} + V(\mathbf{r}) + H_{\text{so}}(\mathbf{P}) + H_Z + H_E + H_v, \quad (9.17)$$

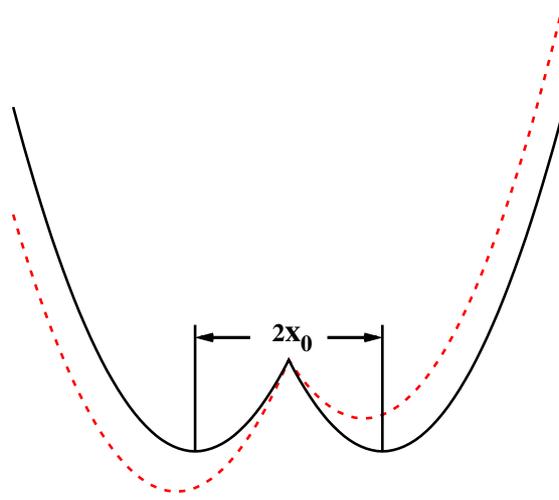


图 9-6: 硅双量子点的示意图。黑色实线表示的是没有外加电场的情况, $2x_0$ 是量子点之间的距离。红色点线对应的是在 x 方向施加了一个电场后的结果。摘自文献 [77]。

$V(\mathbf{r}) = V_c + V_z$, $H_E = eEx$ 表示电场项, 其中外加电场沿着 x 方向, 其它的项在章节 9.2.1 中已经介绍过了。

为了得到单电子基函数, 我们定义 $H_0 = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m_t} + \frac{P_z^2}{2m_z} + V(\mathbf{r})$ 。 H_0 的平面外 (z 方向) 部分可以解析求解, 本征值为 $E_{n_z} = \frac{n_z^2 \pi^2}{8m_z a^2}$, a 表示量子阱阱宽的一半, 相应的本征波函数为

$$\psi_{n_z}(z) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left[\frac{n_z \pi}{2a}(z + a)\right], & |z| \leq a \\ 0, & \text{其它情况} \end{cases}, \quad (9.18)$$

其中 n_z 表示沿着量子阱生长方向的子带指标, 在我们的计算中只考虑阱宽较小的情况, 此时只需要考虑最低的子带。 H_0 的平面内部分很难解析求解, 因为双量子点的侧向约束势 $V_c(x, y)$ 没有旋转对称性, 跟单量子点中的情况不同 [74]。在章节 9.2.1 中我们讲过单个量子点的哈密顿量可以解析求解, 于是我们分别求解左右两个量子点来得到单电子基函数的平面内部分。我们定义 $H_{L,R} = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m_t} + \frac{1}{2}m_t\omega_0^2(x \pm x_0)^2 + \frac{1}{2}m_t\omega_0^2y^2$ 。在左边的量子点中, $H_L = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m_t} + \frac{1}{2}m_t\omega_0^2(x + x_0)^2 + \frac{1}{2}m_t\omega_0^2y^2 = \frac{1}{2m_t}(p_x'^2 + p_y'^2) + \frac{1}{2}m_t\Omega^2(x'^2 + y^2) + w_B(x'p_y' - yp_x')$, 其中 $x' = x + x_0$, $p_y' = p_y - w_Bx_0m_t$, $\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_B^2}$ 以及 $\omega_B = eB_{\perp}/(2m_t)$ 。我们令 $H_L' = \frac{1}{2m_t}(p_x'^2 + p_y'^2) + \frac{1}{2}m_t\Omega^2(x'^2 + y^2)$ 。哈密顿量 H_L 在极坐标下可以解析求解而 H_L' 可以在直角坐标下进行解析求解。考虑到在整个计算过程中使用直角坐标更方便, 我们通过求解 H_L' 而非 H_L 的 Schrödinger 的方程来得到单电

子基函数。本征值具有以下形式 [359, 360]

$$E_{n_x n_y} = \Omega(n_x + n_y + 1), \quad (9.19)$$

$n_{x,y} = 0, 1, 2, \dots$ 分别表示 x 和 y 方向的量子数。相应的本征波函数为

$$F_{n_x n_y}^L(x, y) = N_{n_x n_y} e^{-\alpha^2(x'^2 + y^2)/2} H_{n_x}(\alpha x') H_{n_y}(\alpha y) e^{i w_B x_0 m_t y},$$

其中 $N_{n_x n_y} = \{\alpha^2 / [\pi(2^{n_x + n_y} n_x! n_y!)]\}^{1/2}$, $\alpha = \sqrt{m_t \Omega}$, H_{n_x, n_y} 是 Hermite 多项式。考虑谷自由度后, 本征波函数变为 $\phi_{n_x n_y n_z}^{z, \bar{z}, L} = F_{n_x n_y}^L(x, y) \Psi_{n_z}^{z, \bar{z}}(\mathbf{r}) = F_{n_x n_y}^L(x, y) \psi_{n_z}(z) e^{\pm i k_0 z} u_{z, \bar{z}}(\mathbf{r})$ 。此时我们得到了左边量子点中的单电子基函数, 要想得到右边量子点中的波函数 $\{\phi_{n_x n_y n_z}^{z, \bar{z}, R}\}$, 只需要将左边量子点中的 x_0 替换成 $-x_0$ 即可。

只有 H_v 可以造成谷间耦合, 这里我们取 $\langle \Psi_{n_z}^{z, \bar{z}} | H_v | \Psi_{n_z}^{\bar{z}, z} \rangle = \Delta_{n_z}^1$, $\langle \Psi_{n_z}^{z, \bar{z}} | H_v | \Psi_{n_z}^{z, \bar{z}} \rangle = \Delta_{n_z}^0$ [356]。考虑进这个谷间耦合后, 左边量子点中的单电子本征态变为 $\phi_{n_x n_y n_z}^{\pm L} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{n_x n_y n_z}^{z, L} \pm \phi_{n_x n_y n_z}^{\bar{z}, L})$, 相应的本征值为 $E_{n_x n_y n_z}^{\pm} = E_{n_x n_y} + E_{n_z} + \Delta_{n_z}^0 \pm |\Delta_{n_z}^1|$, $\Delta_{n_z}^{0,1}$ 的具体形式在章节 9.2.1 中已经给过了。我们将左边量子点中本征值和本征态中的 x_0 替换成 $-x_0$ 就可以得到右边量子点中的结果。此时我们得到了一组单电子波函数 $\{\{\phi_{n_x n_y n_z}^{\pm L}\}, \{\phi_{n_x n_y n_z}^{\pm R}\}\}$, 需要指出的是这些基函数是非正交的。

分析完单电子哈密顿量后, 我们来看看两电子的情况, 总的哈密顿量为

$$H_{\text{tot}} = (H_e^1 + H_e^2 + H_C) + H_p + H_{\text{ep}}^1 + H_{\text{ep}}^2, \quad (9.20)$$

其中电子-电子库仑相互作用 H_C 、声子哈密顿量 H_p 以及电子-声子相互作用哈密顿量 H_{ep} 的具体形式参见章节 9.2.1。

为了求解两电子哈密顿量, 我们在单电子波函数 $\{\{\phi_{n_x n_y n_z}^{\pm L}\}, \{\phi_{n_x n_y n_z}^{\pm R}\}\}$ 的基础上构造了两电子基函数, 这些两电子态是以自旋单态或者三态的形式出现的。具体来说, 利用两个单电子空间波函数 $|n_{x1} n_{y1} n_{z1} n_{v1} p_1\rangle$ 和 $|n_{x2} n_{y2} n_{z2} n_{v2} p_2\rangle$ (分别缩记为 $|N_1\rangle$ 和 $|N_2\rangle$; $n_v = \pm$, $p = L/R$) 可以得到自旋单态波函数

$$|S^{(\Xi)}\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \otimes \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}|N_1 N_2\rangle, & N_1 = N_2 \\ \frac{1}{2}(|N_1 N_2\rangle + |N_2 N_1\rangle), & N_1 \neq N_2, \end{cases} \quad (9.21)$$

以及自旋三态波函数 ($N_1 \neq N_2$)

$$|T_+^{(\Xi)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|N_1 N_2\rangle - |N_2 N_1\rangle) \otimes |\uparrow\uparrow\rangle, \quad (9.22)$$

$$|T_0^{(\Xi)}\rangle = \frac{1}{2}(|N_1 N_2\rangle - |N_2 N_1\rangle) \otimes (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (9.23)$$

$$|T_-^{(\Xi)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|N_1 N_2\rangle - |N_2 N_1\rangle) \otimes |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (9.24)$$

特别地，我们将 $p_1 = p_2 = L/R$ 记为 $(2,0)/(0,2)$ 构型，将 $p_1 \neq p_2$ 记为 $(1,1)$ 构型，其中 (n,m) 中 n,m 分别表示左边和右边量子点中的电子数。在这些两电子基函数下，我们计算了两电子哈密顿量的矩阵元，其中电子-电子库仑相互作用矩阵元为

$$\begin{aligned} \langle N_1 N_2 | H_C | N'_1 N'_2 \rangle &= \frac{e^2}{32\pi^3 \epsilon_0 \kappa} \sum_{\gamma_1, \gamma_2, \gamma'_1, \gamma'_2 = z, \bar{z}} \eta_{n_{v1}}^{\gamma_1} \eta_{n_{v2}}^{\gamma_2} \eta_{n'_{v1}}^{\gamma'_1} \eta_{n'_{v2}}^{\gamma'_2} \\ &\times \int d^3 \mathbf{k} \frac{\langle \phi_{n_{x1} n_{y1} n_{z1}}^{\gamma_1, p_1} | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \phi_{n'_{x1} n'_{y1} n'_{z1}}^{\gamma'_1, p'_1} \rangle \langle \phi_{n'_{x2} n'_{y2} n'_{z2}}^{\gamma'_2, p'_2} | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \phi_{n_{x2} n_{y2} n_{z2}}^{\gamma_2, p_2} \rangle^*}{k^2}. \end{aligned} \quad (9.25)$$

在章节 9.2.1 中我们讲过两电子基函数可以根据谷指标分成三个独立的子空间即 $\Xi = +, -, m$ ，这样我们就可以在每个子空间中分别求解本征方程 $\tilde{H}^{(\Xi)} X = \lambda \tilde{S}^{(\Xi)} X$ 从而得到本征值和本征态，其中 $\tilde{H}^{(\Xi)}$ 和 $\tilde{S}^{(\Xi)}$ 分别表示两电子哈密顿量以及基函数之间的交叠矩阵。需要说明的是如果两电子本征态中单态（三态）的成分超过 50%，我们仍然称之为单态（三态）。类似的方法也用于判断两电子态属于 $(2,0)$ 、 $(0,2)$ 或者 $(1,1)$ 构型。有了本征值和本征态后，我们利用费米黄金规则计算了由电子-声子散射导致的不同本征态之间的跃迁几率，这在章节 9.2.1 中已经详细介绍了，这里不再赘述。

9.3.2 数值结果

在之前关于硅双量子点的工作中 [70, 71, 76]，他们只考虑了能量最低的几个基函数。我们发现这些基函数可以保证能谱的收敛但是不能确保跃迁几率的收敛，用最低几个基函数计算得到的能谱跟收敛结果只有 0.1% 的误差，但是用这些波函数计算得到的跃迁几率跟收敛结果却相差四个量级左右。因此，在我们的计算中考虑了能量最低的 1050 个单态和 3060 个三态来确保跃迁几率的收敛。需要指出的是所有的这些基函数都是属于谷构型为“-”的子空间，因为这里我们关心的是谷劈裂较大的情况即能量最低的单三态的谷指标都为“-”。还需要说明的是在之前关于硅双量子点的工作中 [70, 71, 76]，他们用一个 Hubbard 参数 u 来维象地描述库仑相互作用，但是在我们的工作中，我们严格计算了电子-电子库仑相互作用。

9.3.2.1 垂直磁场依赖

我们先来研究一下垂直磁场的情况。量子阱宽选为 $2a = 4.344$ nm，相应的谷劈裂为 $2|\Delta_{n_z}^1| = 0.83$ meV，量子点大小为 $d_0 = 30$ nm，在量子阱生长方向施加一个 30 kV/cm 的外加电场，相应的 Rashba 自旋轨道耦合强度 $a_0 = -6.06$ m/s，IIA 项的强度 $b_0 = -30.31$ m/s [354]。

在图 9-7 中，我们给出了最低的几个能级即 $|S^{(-)}\rangle$ 、 $|T_+^{(-)}\rangle$ 、 $|T_0^{(-)}\rangle$ 以及 $|T_-^{(-)}\rangle$ 随垂直磁场的变化，这里量子点间距选为 $2x_0 = 20$ nm。我们发现三个三态之间的能量间隔完全是由塞曼劈裂决定的。随着磁场的变大， $|S^{(-)}\rangle$ 依次跟 $|T_-^{(-)}\rangle$ 和 $|T_0^{(-)}\rangle$ 发生了相

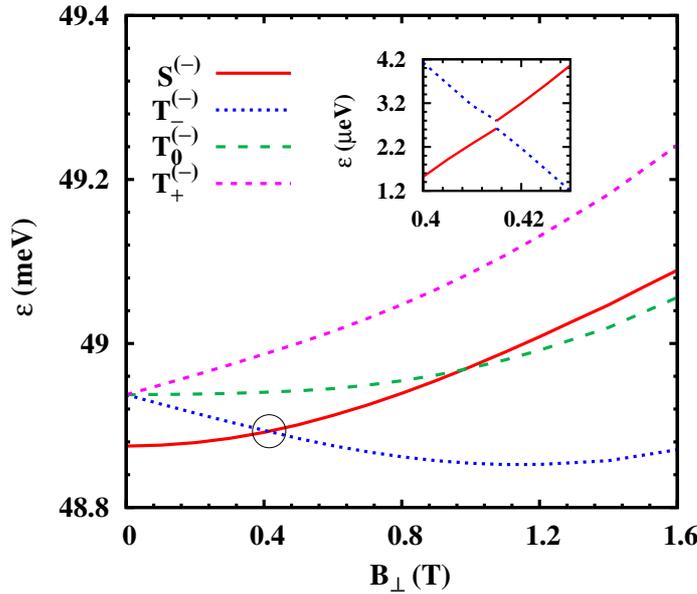


图 9-7: 硅双量子点中最低的四个能级随垂直磁场 B_{\perp} 的变化。 $|S^{(-)}$ 和 $|T_1^{(-)}$ 之间出现了一个反交叉点，我们在插图中放大了反交叉点附近的能谱（去掉了基底能量 48.89 meV）。在计算中，量子点之间的距离为 $2x_0 = 20$ nm。摘自文献 [77]。

交， $|S^{(-)}$ 和 $|T_1^{(-)}$ 的相交点 ($B_{\perp} \sim 0.415$ T) 是一个反交叉点，在能谱中打开了一个很小的能隙 ($\sim 0.17 \mu\text{eV}$) 如图中插图所示。而 $|S^{(-)}$ 和 $|T_0^{(-)}$ 的相交点 ($B_{\perp} \sim 0.98$ T) 就是一个简单的交叉点。

$|S^{(-)}$ 和 $|T_1^{(-)}$ 之间的反交叉点还可以通过改变量子点间距来进行调节。我们在图 9-8 (a) 中给出了 $|S^{(-)}$ 和 $|T_1^{(-)}$ 之间的能量差随垂直磁场和量子点间距的变化，图中黄色实线表示的是 $|T_1^{(-)}$ 和 $|S^{(-)}$ 之间反交叉点出现的位置。我们发现随着量子点间距的增大，反交叉点对应的磁场逐渐变小。这可以从 $|T_1^{(-)}$ 和 $|S^{(-)}$ 的能量差上来理解，该能量差的形式为 $\Delta(B_{\perp}, x_0) = \xi_o + u - g\mu_B B_{\perp}$ ，其中 ξ_o 和 u 分别表示轨道和库仑相互作用的贡献。通过求解方程 $\Delta(B_{\perp}, x_0) = 0$ ，我们可以得到发生反交叉时的临界磁场 B_{\perp}^c 。为了辅助理解 B_{\perp}^c 对量子点间距的依赖关系，我们在图 9-8 (b) 中给出了在零磁场和某一非零磁场（取为 $B_{\perp} = 0.4$ T）时 ξ_o 和 u 随量子点间距的变化，可以看出 ξ_o 随量子点间距的增大而减小而 u 却表现出完全相反的趋势。需要指出的是 u 的增加不足以压制 ξ_o 的减小，因此随着量子点间距的增大， $\xi_o + u$ 会减小使得临界磁场 B_{\perp}^c 也相应地变小。

此外，平面内电场也能有效地调节量子点中的能级，这里考虑电场沿着 x 方向。我们在图 9-9 中给出了最低的四个能级随电场的变化，可以看出当电场比较小的时候能级对电场不敏感但是当电场较强的时候能级随电场的增加而迅速减小。这个电场依赖关系跟 Culcer 等人工作中的结果在定性上是一致的 [70]。另外，我们发现这些能级的能量差几乎跟电场无关。上面的这些行为可以这样来理解。随着电场的增大，这四个态的构

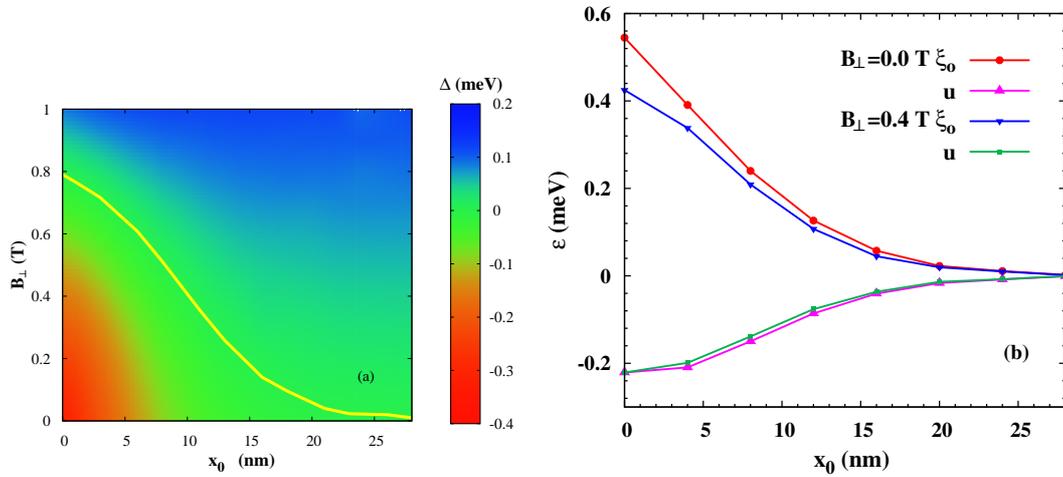


图 9-8: (a) 硅双量子点中能量最低的单态 $|S^{(-)}$ 和能量最低的三态 $|T_{-}^{(-)}$ 之间的能量差随垂直磁场 B_{\perp} 以及量子点间距的一半 x_0 的变化。黄色实线表示 $|S^{(-)}$ 和 $|T_{-}^{(-)}$ 之间反交叉点出现的位置; (b) $|T_{-}^{(-)}$ 和 $|S^{(-)}$ 之间能量差中轨道能量的贡献 ξ_0 和库仑相互作用的贡献 u 在零磁场和 $B_{\perp} = 0.4$ T 时随 x_0 的变化。摘自文献 [77]。

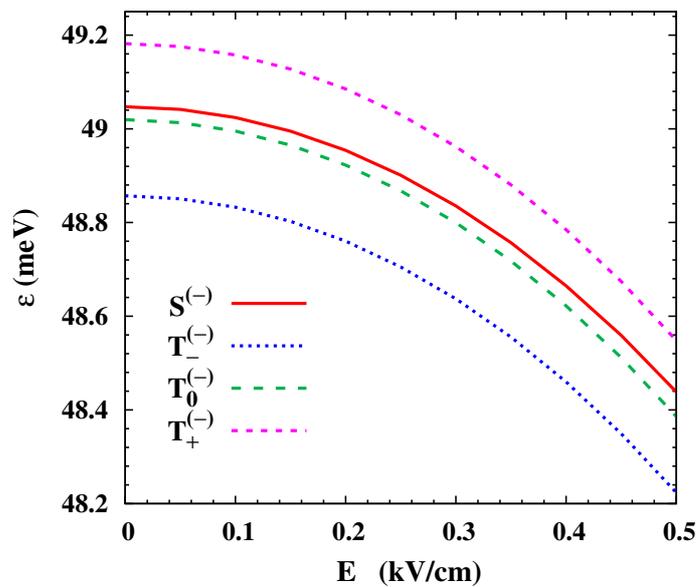


图 9-9: 硅双量子点中最低的四个能级随 x 方向电场的变化。在计算中, 量子点间距 $2x_0 = 20$ nm, 垂直磁场 $B_{\perp} = 1.4$ T。摘自文献 [77]。

型逐渐从 (1,1) 变化到 (2,0)。在 (1,1) 构型下 (小电场区域)，电场压制 (抬高) 了左 (右) 边量子点中的单电子能量，两者相互抵消使得电场的影响明显减弱。但是当电场比较强的时候即在 (2,0) 构型下，两个电子都在左边量子点中使得总的能量随电场的增加而迅速减小。需要指出的是这四个态始终处在同一构型 (1,1) 或者 (2,0) 下，跟电场强度无关。因此，电场对这四个态的影响是一样的，这使得它们之间的能量差对电场不敏感。

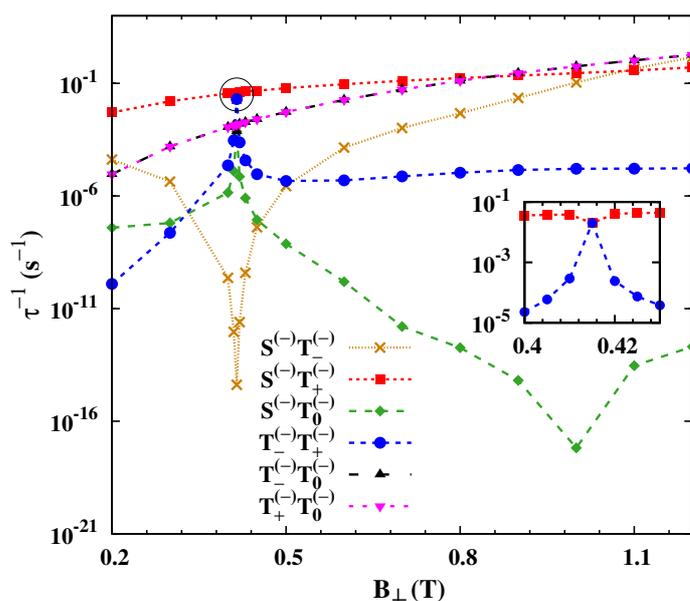


图 9-10: 硅双量子点中跃迁几率随垂直磁场的变化。插图中放大了 $S^{(-)}T_{+}^{(-)}$ 和 $T_{-}^{(-)}T_{+}^{(-)}$ 在反交叉点附近的结果。在计算中，量子点间距 $2x_0 = 20$ nm。摘自文献 [77]。

接下来我们研究一下图 9-7 中四个能级之间的跃迁几率，它们随垂直磁场的变化如图 9-10 所示。我们发现磁场可以非常显著地改变跃迁几率。在反交叉点 ($B_{\perp} \sim 0.415$ T) 附近，跃迁几率表现出非常有意思的行为，所有的跃迁几率 (除了 $|T_{+}^{(-)}\rangle$ 和 $|T_0^{(-)}\rangle$ 之间的) 呈现出一个峰或者谷，这跟硅单量子点中的情况很类似 [74]。具体来说， $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_{-}^{(-)}\rangle$ 之间的跃迁几率对应一个非常明显的谷，原因在于声子能量非常小 [74]。 $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_{+}^{(-)}\rangle$ 之间的以及 $|T_{-}^{(-)}\rangle$ 和 $|T_0^{(-)}\rangle$ 之间的跃迁对应一个谷而 $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_0^{(-)}\rangle$ 之间的以及 $|T_{-}^{(-)}\rangle$ 和 $|T_{+}^{(-)}\rangle$ 之间的对应一个峰，这些峰和谷的行为都来源于 $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_{-}^{(-)}\rangle$ 在反交叉点附近非常大的自旋混合。当远离反交叉点的时候，跃迁几率的变化可以通过声子能量的改变来理解 [61, 65, 74]。

我们还研究了垂直磁场下量子点间距对跃迁几率的影响，结果如图 9-11 所示。在 $x_0 \sim 12$ nm 的时候， $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_{-}^{(-)}\rangle$ 的能级之间会出现一个反交叉点。在这个反交叉点附近，跃迁几率的行为跟上面讨论的磁场依赖关系中的非常类似， $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_{-}^{(-)}\rangle$ 之间的跃迁几率被非常强烈地压制了，其它跟这两个态相关的跃迁几率呈现出一个峰或者谷。由此可见，改变量子点间距也能有效地调节单三态弛豫，量子点间距在实验上可以

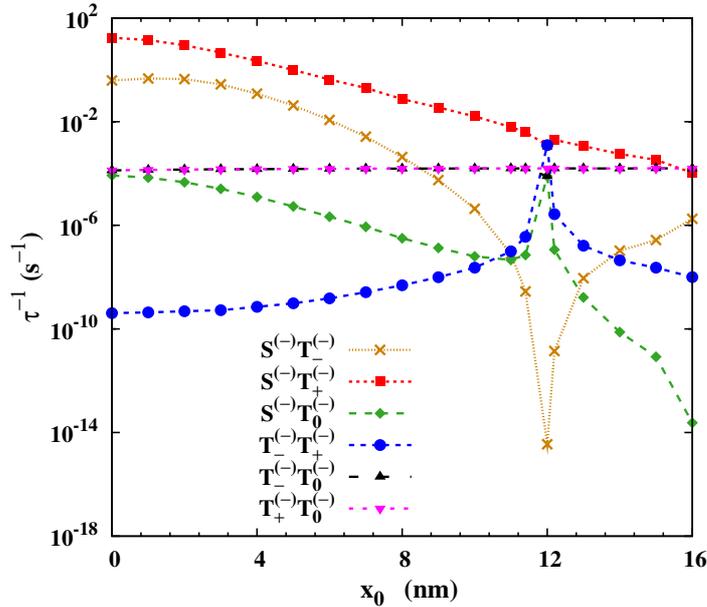


图 9-11: 硅双量子点中跃迁几率对量子点间距的一半的依赖关系。在计算中, 垂直磁场 $B_{\perp} = 0.3$ T。摘自文献 [77]。

利用电学方法来控制。此外, 我们还分析了跃迁几率随平面内电场的变化, 我们发现跃迁几率几乎不随电场变化。这个行为来源于发生跃迁的两个能级之间的能量差对电场不敏感, 这可以从图 9-9 中看出来, 在前面已经讨论过了。这个性质对自旋操控非常有意义, 因为当改变电场使得量子比特构型从 (1, 1) 变到 (2, 0) 的时候, 量子态的寿命几乎保持不变。

9.3.2.2 平行磁场依赖

我们再来看一下平行磁场的情况, 这里假设磁场沿着 x 方向。量子阱阱宽、量子点大小、Rashba 自旋轨道耦合和 IIA 项的强度都跟垂直磁场中的一样。图 9-12 中给出了最低四个能级 $|S^{(-)}\rangle$ 、 $|T_+^{(-)}\rangle$ 、 $|T_0^{(-)}\rangle$ 以及 $|T_-^{(-)}\rangle$ 随平行磁场的变化, 我们发现 $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_0^{(-)}\rangle$ 的能量几乎跟磁场无关而 $|T_+^{(-)}\rangle$ 和 $|T_-^{(-)}\rangle$ 的能级呈现出线性依赖关系。这是因为平行磁场只起到了一个塞曼劈裂的作用, 对 $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_0^{(-)}\rangle$ 而言, 总自旋的 x 分量几乎为零导致可忽略的塞曼劈裂, 对 $|T_+^{(-)}\rangle$ 和 $|T_-^{(-)}\rangle$ 来说, 总自旋的 x 分量几乎为 ± 1 , 这使得两个能级随磁场线性变化。此外, 我们还发现 $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_-^{(-)}\rangle$ 的能级在 $B_{\parallel} \sim 0.54$ T 的时候会发生相交, 这个相交点是一个反交叉点。

图 9-13 中我们给出了弛豫率随平行磁场和量子点间距的变化, 我们发现跃迁几率的行为跟垂直磁场中的情况非常类似。这里, 当我们改变平行磁场或者量子点间距的时候 $|S^{(-)}\rangle$ 和 $|T_-^{(-)}\rangle$ 的能级之间出现了反交叉点, 在反交叉点附近跟这两个态相关的跃迁几率表现出峰或者谷的行为。

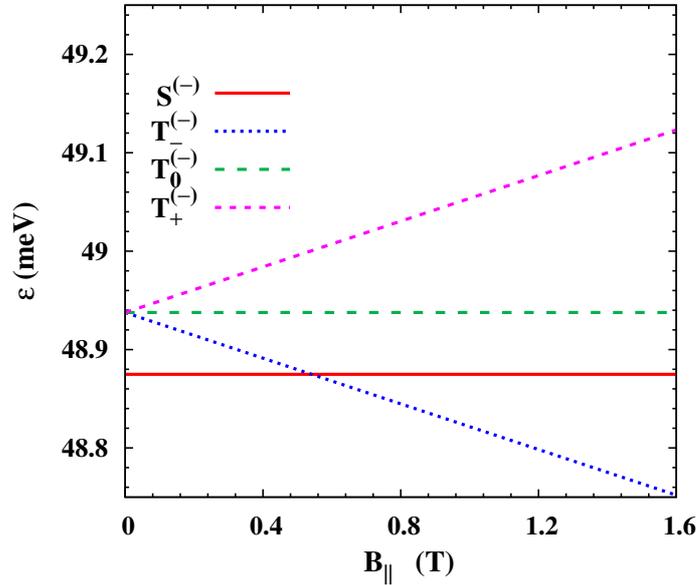


图 9-12: 硅双量子点中最低四个能级随平行磁场 $B_{||}$ 的变化。在计算中, 量子点间距 $2x_0 = 20$ nm。摘自文献 [77]。

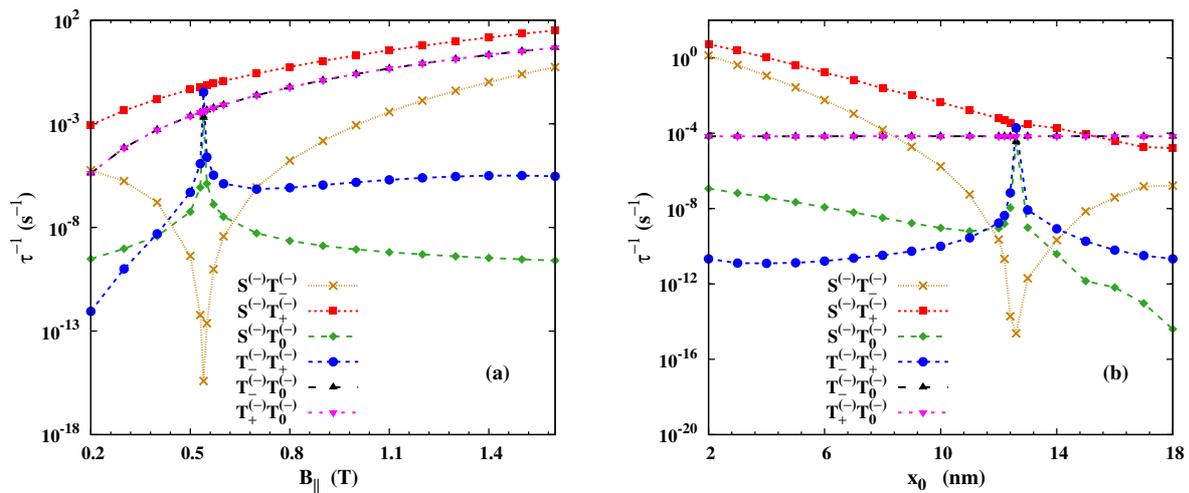


图 9-13: 硅双量子点中 (a) 跃迁几率随平行磁场 $B_{||}$ 的变化, 量子点间距 $2x_0 = 20$ nm; (b) 跃迁几率随量子点间距的一半的变化, 平行磁场 $B_{||} = 0.3$ T。摘自文献 [77]。

9.4 小结

在本章中，我们详细讨论了硅单量子点和侧向耦合的双量子点中最低的几个能级以及这些能级之间的跃迁几率。我们严格考虑了电子-电子库仑相互作用和多谷效应并选取了足够多的基函数来确保能谱和跃迁几率的收敛。在能谱的磁场、量子点大小或者量子点间距的依赖关系中我们发现了交叉/反交叉点，在反交叉点附近单态和其中一个三态的能级之间会打开一个小的能隙，这来源于自旋轨道耦合的作用。跟这两个态相关的通道的驰豫率表现出峰或者谷的行为。此外，我们发现硅量子点中的跃迁几率要比 GaAs 中的小四个量级左右。需要特别指出的是，在单量子点中，我们的模型在平行磁场下的结果跟实验测量值吻合得非常的好，由此我们确定了实验中测量的驰豫时间对应的是最低单态的寿命。我们还预言单三态驰豫率的磁场依赖关系中会出现一个峰，这有待实验检验。在双量子点中，我们研究了平面内电场对能谱和跃迁几率的影响。我们发现随着电场的变大，最低四个能级的构型都从 (1,1) 变到 (2,0)。但是这几个能级之间的跃迁几率几乎不随电场变化，这对自旋操控非常有意义，因为在量子比特构型改变的过程中量子态的寿命几乎保持不变。

第十章 总结

本论文主要讨论了二维系统中的载流子自旋动力学，包括半导体量子阱中的电子和轻重空穴自旋弛豫、双层石墨烯中的电子自旋弛豫以及单层 MoS_2 中的电子自旋弛豫和自旋扩散。我们还研究了单层石墨烯中的拓扑超导体和 Majorana 费米子以及硅单量子点和侧向耦合的双量子点中的单三态弛豫。

在第 1 章中，我们先从自旋电子学器件的角度出发简单回顾了自旋电子学的发展，然后介绍了对自旋电子学器件的实现起着非常重要作用的两个物理过程即时间域的自旋弛豫和空间域的自旋输运，在时间域的自旋弛豫中我们着重讨论了新型二维材料单双层石墨烯和单层 MoS_2 中相关的理论和实验研究现状。在第 2 章中，我们先介绍了研究载流子自旋动力学的方法即动力学自旋 Bloch 方程方法，然后从该方程出发讨论了时间域和空间域的自旋弛豫机制。

在第 3 章中，我们研究了 (111) GaAs 量子阱中电子以及轻重空穴的自旋弛豫。在 (111) GaAs 量子阱中，电子和轻重空穴各自的 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合的平面内分量可以发生相消，具体来说，电子和轻空穴的总的平面内有效磁场只能在某一特殊的动量圈上严格为零而重空穴的在整个动量空间几乎可以完全相消。不同的相消方式对自旋弛豫的影响很不一样。对重空穴而言，我们在自旋弛豫时间的门电压依赖关系中预言了一个非常明显的峰，自旋弛豫时间最长可以达到几百纳秒。更重要的是，这种自旋弛豫被强烈压制的行为对温度、空穴浓度和杂质浓度都不敏感。对电子和轻空穴而言，我们在自旋弛豫时间的门电压依赖关系中也能看到一个峰，但是这个峰跟重空穴的相比明显弱了很多。上面提到的自旋弛豫时间都是指自旋极化沿着平面外方向的，对于自旋极化在平面内的情况，自旋弛豫会快很多，平面内外的自旋弛豫表现出很强的各向异性。

除了半导体量子阱外，我们还考察了新型二维材料中的自旋动力学。在第 4 章中，我们研究了双层石墨烯中最低导带电子的 DP 自旋弛豫。最低导带的自旋轨道耦合的解析形式是利用对称性分析构造的，其中自旋轨道耦合的系数是通过拟合 Kunschuh 等人 [179] 工作中第一性原理计算的结果得到的。我们发现自旋轨道耦合的大小在动量较大的时候随动量的增加而减小，这不同于半导体和单层石墨烯中的情况。另外，自旋轨道耦合平面外分量的主导项是一个类 Zeeman 项，它提供的有效磁场在两个能谷中大小相等方向相反，这跟弯曲的单层石墨烯中的情况类似。这个类 Zeeman 项跟谷间散射（包括谷间电子-声子和可能存在的谷间短程杂质散射）一起可以打开一个谷间自旋弛豫通道。我们发现谷间电子-声子散射在高温下可以非常明显地压制平面内自旋弛豫时间。跟谷间电子-声子散射不同的是，谷间短程杂质散射对温度不敏感，可以在低温下

对平面内自旋弛豫起着很重要的作用。实际上，自旋轨道耦合的平面内分量中也存在类 Zeeman 项，但是这些项是动量的高阶项，对平面外自旋弛豫的贡献几乎可以忽略。这意味着平面内和平面外的自旋弛豫可能有非常强的各向异性。具体来说，在不考虑短程杂质的时候，我们发现随着温度的升高平面内自旋弛豫时间会先减小后变大，自旋弛豫时间最小可以达到几百皮秒。这个非单调行为的物理原因在于温度升高的过程中谷间电子-声子散射会从弱散射区变到强散射区。此外，我们在低温下平面内自旋弛豫时间的电子浓度依赖关系中观察到了一个峰，这个峰跟半导体中的很不一样。我们还发现平面内自旋弛豫时间在低温下随初始自旋极化的增大而迅速减小，跟半导体和单层石墨烯中的行为完全相反。对平面外自旋弛豫时间而言，它在高温下比平面内的自旋弛豫时间大两个量级左右，此时平面内外自旋弛豫表现出很强的各向异性。我们还将理论模型跟最近的实验做了非常详细的比较。在不考虑谷间散射的时候，我们的理论计算结果始终比实验测量值大好几个量级。考虑进谷间电子-声子散射后，我们的计算结果在高温下跟实验值比较接近，这表明谷间电子-声子散射在高温下对平面内自旋弛豫起着很重要的作用，但在低温下仍然比实验值大几个量级。进一步考虑进对温度不敏感的谷间短程杂质散射后，我们的结果在低温下跟实验结果吻合得非常好。

紧接着在第 5 章中，我们研究了单层 MoS_2 中的电子自旋弛豫。利用 Löwdin 块对角化的方法我们构造了 K (K') 点附近最低导带的有效哈密顿量，其中包括了保留到动量的三次方项的自旋轨道耦合。自旋轨道耦合中包含谷指标的项扮演着类 Zeeman 项的角色，它可以在谷间电子-声子散射的作用下打开 DP 机制下的谷间自旋弛豫通道，这跟弯曲的单层石墨烯以及第 4 章中讨论过的双层石墨烯中的情况类似。此外，自旋轨道耦合还是动量依赖的，它可以导致 DP 机制下的谷内自旋弛豫。除了 DP 自旋弛豫外，我们还计算了由导带价带间自旋混合导致的 EY 自旋弛豫。我们发现在平面内自旋弛豫中 DP 机制始终占据主导地位。在该机制下，谷内自旋弛豫过程在低温下扮演着更重要的角色，但是在高温下，谷间自旋弛豫过程变得更重要。当温度介于两者之间的时，随着电子浓度的变大，主要的自旋弛豫过程由谷间变到谷内。另外，对于谷间自旋弛豫过程而言，我们发现自旋弛豫时间随温度升高、电子浓度增加以及初始自旋极化变大都表现出单调减小的行为，这是因为谷间电子-声子散射始终处在弱散射区，跟单双层石墨烯中的情况有所不同，这是因为单层 MoS_2 中的自旋轨道耦合强度要比石墨烯中的来得远大。对于谷内自旋弛豫过程来说，电子-电子库仑散射始终占据主导地位，这个结论在杂质浓度比较高的时候依然成立，原因在于电子-杂质散射只有跟自旋轨道耦合中可忽略的各向异性项一起才能引起谷内自旋弛豫，这跟半导体和石墨烯中的情况很不一样。此外，谷内自旋弛豫时间在简并区随温度的升高而减小，这跟半导体中的情况完全相反。两者差异的根源在于自旋轨道耦合的形式不同，在单层 MoS_2 中自旋轨道耦合的主导项只跟动量的大小有关而在半导体中自旋轨道耦合除了依赖于动量的大小外还跟动量的方向有关。除了平面内自旋弛豫，我们还研究了平面内磁场导致的平面外自旋弛豫，平面外自旋弛豫时间随平面内磁场的增大而变小。在上面的计算中，导带和价带的自旋轨道耦合提供的有效磁场在 K (K') 处是同向的。但是最近的一些理论研究表明

在 K (K') 处导带的自旋轨道耦合的有效磁场跟价带的是方向相反的。我们根据最近的理论工作重新计算了单层 MoS_2 中的自旋弛豫，发现跟上面的结果相比出现了一些新的物理现象。对平面内自旋弛豫来说，当电子浓度较高的时候，总的 DP 自旋弛豫时间随温度呈现非单调变化，这是由谷间自旋弛豫过程导致的。对于平面外自旋弛豫而言，自旋弛豫时间随磁场的增加先减小后变大。

之后我们在第 6 章中讨论了单层 MoS_2 中的电子自旋扩散。空间域中自旋进动频率是各向异性的，它会使得电子-杂质散射在平面内自旋扩散的过程中扮演着非常重要的角色，这跟第 5 章中讲过的单层 MoS_2 中电子-杂质散射在时间域的自旋弛豫中可忽略形成了鲜明的对比。通过解析求解动力学自旋 Bloch 方程，我们研究了平面内自旋扩散的谷内和谷间过程，其中谷内过程中只考虑了电子-杂质散射而谷间过程只包括了谷间电子-声子散射。我们发现谷内自旋扩散长度远小于谷间自旋扩散长度，这表明谷内自旋扩散过程始终占据主导地位，不同于单层 MoS_2 中时间域的自旋弛豫中的情况，在自旋弛豫中谷间过程可以跟谷内过程相比拟，有的时候甚至可以比谷内过程更重要。在占据主导地位的谷内过程中，我们发现自旋扩散长度随杂质浓度的增加而变小但是随电子浓度的变大而增大。非常有意思的是，在谷内过程中进一步考虑电子-电子库仑散射后，谷内自旋扩散长度在非简并极限下随电子浓度的增加而减小，跟只有电子-杂质散射的情况完全相反。

除了二维系统中的载流子自旋动力学外，我们还研究了拓扑超导体和 Majorana 费米子。在第 7 章中我们回顾了 Majorana 费米子相关研究的历史，Majorana 费米子的研究最早是在粒子物理领域，最近人们发现 Majorana 费米子也有可能存在于凝聚态系统中，其中一类特殊的凝聚态系统即拓扑超导体被认为是实现 Majorana 费米子最有力的候选。我们具体介绍了几个典型的拓扑超导体包括有效 p 波超导体和基于量子反常霍尔绝缘体的拓扑超导体。在第 8 章中，我们提出在近邻导致的 s 波超导配对存在的时候，单层石墨烯中由 Rashba 自旋轨道耦合和交换场引起的量子反常霍尔态可以变成一个二维拓扑超导体。在 Dirac 点附近非常低掺杂甚至零掺杂的时候，该拓扑超导体的 Chern 数可以达到 4，有四个受拓扑保护的 Majorana 边界态。更重要的是，该拓扑超导体有一个很大的体能隙，它可以比近邻引入的超导配对势强度还大，有的时候甚至可以大一个量级。这个非常独特的性质跟之前被广泛研究的有效 p 波超导体中的情况完全不同，在有效 p 波超导体中能隙始终比近邻引入的超导配对势强度来得小。

最后在第 9 章中，我们详细讨论了硅单量子点和侧向耦合的双量子点中的单三态弛豫。我们严格考虑了对量子点中电子能谱起着非常重要作用的电子-电子库仑相互作用以及由界面耦合导致的能谷劈裂。我们利用严格对角化和费米黄金规则的方法分别计算了体系的能谱和能级间的跃迁几率，在计算的过程中我们选取了足够多的基函数来确保能谱和跃迁几率的收敛。我们发现磁场、量子点大小和量子点间距不仅对最低的几个能级有非常大的影响还能有效地调节这些能级间的跃迁几率。此外，在能谱的磁场、量子点大小和量子点间距的依赖关系中，我们都发现了交叉/反交叉点，在反交叉点附近单态和其中一个三态的能级之间会打开一个小的能隙，这来源于自旋轨道耦合的作用。跟

这两个态相关的通道的弛豫率在反交叉点附近表现出峰或者谷的行为。需要特别指出的是，在单量子点中，我们的模型在平行磁场下的结果很好地解释了最近的实验，并确定了实验中测量的弛豫时间对应的是最低单态的寿命。此外，在单三态弛豫率的磁场依赖关系中我们还预言了一个峰，这个峰有待实验检验。在双量子点中，我们考虑了平面内电场对能谱和跃迁几率的影响。我们发现在电场变大的过程中，最低四个能级的构型都从 (1,1) 变到 (2,0)。有意思的是，这几个能级之间的跃迁几率对电场很不敏感，这对自旋操控非常有意义，因为在量子比特构型改变的过程中量子态的寿命几乎保持不变。

附录A (111) GaAs 量子阱中的一些补充说明

A.1 轻重空穴的有效质量和自旋轨道耦合系数

这里我们给出 (111) GaAs 量子阱中轻重空穴的有效质量和自旋轨道耦合（包括 Dresselhaus 和 Rashba）的系数。在 (111) GaAs/AlAs 量子阱中能量最低的空穴子带为重空穴，它的平面内有效质量 m_t^h 以及 Dresselhaus (Rashba) 自旋轨道耦合系数 β_i^h (α_i^h) ($i = x, y, z$) 的具体形式如下

$$\frac{1}{m_t^h} = \frac{\gamma_1 + \gamma_3}{m_0} - \sum_{n_z \neq 1} \frac{2B_1^2 Q_{1n_z}^2}{\Delta_{n_z 1}^{lh}} - \frac{2C_1^2}{\Delta_{11}^{lh}}, \quad (\text{A.1})$$

$$\beta_x^h = \frac{b_{42}}{\sqrt{3}} - \frac{4(C_1 B_3 + B_2 C_3)}{\Delta_{11}^{lh}} + \sum_{n_z \neq 1} \frac{4(B_1 C_4 + 2C_2 B_2) Q_{1n_z}^2}{\Delta_{n_z 1}^{lh}}, \quad (\text{A.2})$$

$$\beta_y^h = \frac{-b_{51} + b_{52}}{\sqrt{3}} + \frac{4(C_1 B_3 - B_2 C_3)}{\Delta_{11}^{lh}} + \sum_{n_z \neq 1} \frac{4(2C_2 B_2 - B_1 C_4) Q_{1n_z}^2}{\Delta_{n_z 1}^{lh}}, \quad (\text{A.3})$$

$$\beta_z^h = -\frac{\sqrt{6}}{2} b_{41} - \frac{23\sqrt{6}}{24} b_{42} + \frac{4(C_3 B_3 - C_1 B_2)}{\Delta_{11}^{lh}} + \sum_{n_z \neq 1} \frac{4(B_1 C_2 - 2B_2 C_4) Q_{1n_z}^2}{\Delta_{n_z 1}^{lh}}, \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} \alpha_x^h &= \sum_{n_z \neq 1} \frac{4P_{1n_z} Q_{1n_z}}{\Delta_{n_z 1}^{lh} \Delta_{n_z 1}^{hh}} (B_1 B_3 - C_1 C_4 n_z^2 + 2B_2^2 - C_2 C_3 n_z^2) \\ &\quad + \sum_{n_z \neq 1} \frac{4P_{1n_z} Q_{1n_z}}{\Delta_{11}^{lh}} \left(\frac{1}{\Delta_{n_z 1}^{lh}} - \frac{1}{\Delta_{n_z 1}^{hh}} \right) (B_1 B_3 - C_1 C_4 + 2B_2^2 - C_2 C_3), \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} \alpha_y^h &= \sum_{n_z \neq 1} \frac{4P_{1n_z} Q_{1n_z}}{\Delta_{n_z 1}^{lh} \Delta_{n_z 1}^{hh}} (B_1 B_3 - C_1 C_4 n_z^2 - 2B_2^2 + C_2 C_3 n_z^2) \\ &\quad + \sum_{n_z \neq 1} \frac{4P_{1n_z} Q_{1n_z}}{\Delta_{11}^{lh}} \left(\frac{1}{\Delta_{n_z 1}^{lh}} - \frac{1}{\Delta_{n_z 1}^{hh}} \right) (B_1 B_3 - C_1 C_4 - 2B_2^2 + C_2 C_3), \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} \alpha_z^h &= \sum_{n_z \neq 1} \frac{4P_{1n_z} Q_{1n_z}}{\Delta_{n_z 1}^{lh} \Delta_{n_z 1}^{hh}} (B_1 B_2 - C_1 C_2 n_z^2 - 2B_2 B_3 + C_3 C_4 n_z^2) \\ &\quad + \sum_{n_z \neq 1} \frac{4P_{1n_z} Q_{1n_z}}{\Delta_{11}^{lh}} \left(\frac{1}{\Delta_{n_z 1}^{lh}} - \frac{1}{\Delta_{n_z 1}^{hh}} \right) (B_1 B_2 - C_1 C_2 - 2B_2 B_3 + C_3 C_4). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

在 (111) GaAs/InP 量子阱中能量最低的空穴子带为轻空穴，它的平面内有效质量 m_t^l 、Dresselhaus 自旋轨道耦合系数 $\beta_x^{l1, l2}, \beta_z^l$ 以及 Rashba 自旋轨道耦合系数 $\alpha_{x,z}^l$ 可

以写成

$$\frac{1}{m_t^l} = \frac{\gamma_1 - \gamma_3}{m_0} - \frac{2(C_1^2 + C_3^2)}{\Delta_{11}^{hl}} - \sum_{n_z \neq 1} \frac{2}{\Delta_{n_z 1}^{hl}} (B_1^2 + 4B_2^2) Q_{1n_z}^2, \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} \beta_x^{l1} &= \frac{4b_{41} + 7b_{42}}{4\sqrt{3}} - \frac{\sqrt{3}}{2}(b_{51} + b_{52}) - \frac{4}{\Delta_{11}^{hl}} (B_2 C_3 - C_1 B_3) \\ &+ \sum_{n_z \neq 1} \frac{4(-B_1 C_4 + 2C_2 B_2) Q_{1n_z}^2}{\Delta_{n_z 1}^{hl}}, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\beta_x^{l2} = -\frac{4\sqrt{3}b_{41}}{3} - \frac{7\sqrt{3}b_{42}}{3} - \sqrt{3}b_{52}, \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} \beta_z^l &= -\frac{\sqrt{6}b_{41}}{6} - \frac{13\sqrt{6}b_{42}}{24} - \frac{4(C_1 B_2 + C_3 B_3)}{\Delta_{11}^{hl}} \\ &+ \sum_{n_z \neq 1} \frac{4(B_1 C_2 + 2B_2 C_4) Q_{1n_z}^2}{\Delta_{n_z 1}^{hl}}, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} \alpha_x^l &= \sum_{n_z \neq 1} \frac{4P_{1n_z} Q_{1n_z}}{\Delta_{n_z 1}^{ll} \Delta_{n_z 1}^{hl}} (B_1 B_3 - C_1 C_4 n_z^2 - 2B_2^2 + C_2 C_3 n_z^2) \\ &+ \sum_{n_z \neq 1} \frac{4P_{1n_z} Q_{1n_z}}{\Delta_{11}^{hl}} \left(\frac{1}{\Delta_{n_z 1}^{hl}} - \frac{1}{\Delta_{11}^{ll}} \right) (B_1 B_3 - C_1 C_4 - 2B_2^2 + C_2 C_3), \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} \alpha_z^l &= -\sum_{n_z} \frac{4W_1 P_{1n_z} Q_{1n_z}}{\Delta_{11}^{hl} \Delta_{n_z 1}^{hl}} - \sum_{n_z \neq 1} \frac{4W_1 P_{1n_z} Q_{1n_z} n_z^2}{\Delta_{n_z 1}^{ll^2}} - \sum_{n_z \neq 1} \frac{4P_{1n_z} Q_{1n_z}}{\Delta_{n_z 1}^{ll} \Delta_{11}^{hl}} (-B_1 B_2 \\ &+ C_1 C_2 - 2B_2 B_3 + C_3 C_4) + \sum_{n_z \neq 1} \frac{4P_{1n_z} Q_{n_z 1}}{\Delta_{n_z 1}^{ll} \Delta_{n_z 1}^{hl}} (B_1 B_2 - C_1 C_2 n_z^2 \\ &+ 2B_2 B_3 - C_3 C_4 n_z^2). \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

在上面的方程中, γ_i 是 Kohn-Luttinger 参数; $b_{41,42,51,52}$ 表示块体材料中价带的 Dresselhaus 自旋轨道耦合系数; $\Delta_{n_1 n_2}^{hh}$ ($\Delta_{n_1 n_2}^{ll}$) 是重空穴 (轻空穴) 的第 n_1 和 n_2 个子带间的能量差; $\Delta_{n_1 n_2}^{hl}$ 代表第 n_1 个重空穴子带和第 n_2 个轻空穴子带之间的能量劈裂。另外一些参数为, $B_1 = \frac{\sqrt{3}(2\gamma_2 + \gamma_3)}{3m_0}$, $B_2 = \frac{\sqrt{6}(-\gamma_2 + \gamma_3)}{6m_0}$, $B_3 = \frac{\sqrt{3}(\gamma_2 + 2\gamma_3)}{6m_0}$, $C_1 = (b_{41} + \frac{9}{4}b_{42} - \frac{1}{2}b_{52})\frac{\pi^2}{a^2}$, $C_2 = \frac{\sqrt{2}}{4}(b_{41} + \frac{9}{4}b_{42} - b_{51} + b_{52})$, $C_3 = \frac{\sqrt{2}\pi^2}{4a^2}(2b_{42} + b_{52})$, $C_4 = \frac{1}{4}(b_{42} + b_{51} - b_{52})$, $P_{n_1 n_2} = \frac{4an_1 n_2 [(-1)^{n_1 + n_2} - 1]}{(n_1^2 - n_2^2)^2 \pi^2} (1 - \delta_{n_1, n_2})$, $Q_{n_1 n_2} = \frac{2n_1 n_2 [(-1)^{n_1 + n_2} - 1]}{(n_1^2 - n_2^2)a} (\delta_{n_1, n_2} - 1)$, $W_1 = \frac{3\sqrt{2}\pi^2}{a^2} (\frac{1}{6}b_{41} + \frac{7}{24}b_{42} + \frac{1}{4}b_{51} - \frac{1}{4}b_{52}) (\frac{2}{3}b_{41} + \frac{7}{6}b_{42} + \frac{1}{2}b_{52})$ 。

A.2 公式 (3.5) 中 $H_L, H_{8v8v}^b, H_\epsilon$ 的具体形式

公式 (3.5) 中 $H_L, H_{8v8v}^b, H_\epsilon$ 的具体形式如下。Luttinger 哈密顿量 H_L 可以写成

[240] (基为 J_z 的本征态, 对应的本征值依次为 $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$)

$$H_L = \begin{pmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{pmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

$$F = \frac{1}{2m_0}[(\gamma_1 + \gamma_3)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 - 2\gamma_3)k_z^2], \quad (\text{A.15})$$

$$G = \frac{1}{2m_0}[(\gamma_1 - \gamma_3)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 + 2\gamma_3)k_z^2], \quad (\text{A.16})$$

$$H = -\frac{1}{2m_0}\left[\frac{\sqrt{6}}{3}(-\gamma_2 + \gamma_3)k_+^2 + \frac{2\sqrt{3}}{3}(2\gamma_2 + \gamma_3)k_-k_z\right], \quad (\text{A.17})$$

$$I = -\frac{1}{2m_0}\left[\frac{\sqrt{3}}{3}(\gamma_2 + 2\gamma_3)k_-^2 + \frac{2\sqrt{6}}{3}(-\gamma_2 + \gamma_3)k_+k_z\right]. \quad (\text{A.18})$$

这里, $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ 。

块体材料中的轻重空穴的 Dresselhaus 自旋轨道耦合 H_{8v8v}^b 具有以下形式 [86]

$$\begin{aligned} H_{8v8v}^b = & -b_{41}(\{k'_x, k'_y{}^2 - k'_z{}^2\}J'_x + \text{cp}) - b_{42}(\{k'_x, k'_y{}^2 - k'_z{}^2\}J'_x{}^3 + \text{cp}) \\ & - b_{51}(\{k'_x, k'_y{}^2 + k'_z{}^2\}\{J'_x, J'_y{}^2 - J'_z{}^2\} + \text{cp}) - b_{52}(k'_x{}^3\{J'_x, J'_y{}^2 - J'_z{}^2\} + \text{cp}), \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

其中, $k'_x = \frac{1}{\sqrt{6}}k_x - \frac{1}{\sqrt{2}}k_y + \frac{1}{\sqrt{3}}k_z$, $k'_y = \frac{1}{\sqrt{6}}k_x + \frac{1}{\sqrt{2}}k_y + \frac{1}{\sqrt{3}}k_z$, $k'_z = -\frac{2}{\sqrt{6}}k_x + \frac{1}{\sqrt{3}}k_z$, $J'_x = \frac{1}{\sqrt{6}}J_x - \frac{1}{\sqrt{2}}J_y + \frac{1}{\sqrt{3}}J_z$, $J'_y = \frac{1}{\sqrt{6}}J_x + \frac{1}{\sqrt{2}}J_y + \frac{1}{\sqrt{3}}J_z$, $J'_z = -\frac{2}{\sqrt{6}}J_x + \frac{1}{\sqrt{3}}J_z$ 。 J_i ($i = x, y, z$) 是自旋为 $\frac{3}{2}$ 的角动量矩阵, $\{A, B\} = AB + BA$, cp 表示指标的循环置换 ($x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$)。

Bir-Pikus 应力哈密顿量 H_{ϵ} 为 [86, 241]

$$H_{\epsilon} = \text{diag}(-E_S^1, E_S^1, E_S^1, -E_S^1) - E_S^2 I_4, \quad (\text{A.20})$$

$$E_S^1 = 2D'_u \epsilon_a, \quad (\text{A.21})$$

$$E_S^2 = 3D_d \epsilon_b, \quad (\text{A.22})$$

$$\epsilon_a = -\frac{1}{3}\left(1 + \frac{1}{\sigma^{(111)}}\right)\epsilon_{\parallel}, \quad (\text{A.23})$$

$$\epsilon_b = \frac{1}{3}\left(2 - \frac{1}{\sigma^{(111)}}\right)\epsilon_{\parallel}, \quad (\text{A.24})$$

$$\epsilon_{\parallel} = \frac{a_s - a_e}{a_e}, \quad (\text{A.25})$$

$$\sigma^{(111)} = \frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{2C_{11} + 4C_{12} - 4C_{44}}. \quad (\text{A.26})$$

这里, D'_u 和 D_d 是形变势常数; a_e 和 a_s 分别表示母体 (GaAs) 和衬底 (AlAs/InP) 的晶格常数; C_{11}, C_{12}, C_{44} 是刚度常数 [86, 241]。

A.3 空穴子带间的自旋混合 $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$

(111) GaAs 量子阱中空穴子带间的自旋混合 $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ 可以引起自旋翻转散射导致 EY 自旋弛豫。这里我们只关注 GaAs/AlAs 量子阱中最低重空穴子带与其它空穴子带的自旋混合以及 GaAs/InP 量子阱中最低轻空穴子带与其它空穴子带的自旋混合。自旋混合的一般形式为 $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \hat{I} - \frac{1}{2} \sum_{n_z} (S_{\mathbf{k}}^{(1)} S_{\mathbf{k}}^{(1)\dagger} - 2S_{\mathbf{k}}^{(1)} S_{\mathbf{k}'}^{(1)\dagger} + S_{\mathbf{k}'}^{(1)} S_{\mathbf{k}'}^{(1)\dagger})$, \hat{I} 是 2×2 的单位阵。对于 GaAs/AlAs 量子阱中最低重空穴子带而言, $S_{\mathbf{k}}^{(1)}$ 可以写成

$$S_{\mathbf{k}}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{H_{14}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{hh}} & -\frac{H_{12}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{hl}} & -\frac{H_{13}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{hl}} \\ -\frac{H_{41}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{hh}} & 0 & -\frac{H_{42}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{hl}} & -\frac{H_{43}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{hl}} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.27})$$

$H_{ij}^{1n_z} = \langle 1 | H_{ij} | n_z \rangle$, H_{ij} 表示哈密顿量 $H_{4 \times 4}$ [参见公式 (3.5)] 的第 i 行第 j 列。 $\Delta_{1n_z}^{hh}$ 是第一和第 n_z 个重空穴子带间的能量差, $\Delta_{1n_z}^{hl}$ 是第一个重空穴子带和第 n_z 个轻空穴子带间的能量差。

对于 GaAs/InP 量子阱中最低轻空穴子带而言, $S_{\mathbf{k}}^{(1)}$ 的形式为

$$S_{\mathbf{k}}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{H_{23}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{lh}} & -\frac{H_{21}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{lh}} & -\frac{H_{24}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{lh}} \\ -\frac{H_{32}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{lh}} & 0 & -\frac{H_{31}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{lh}} & -\frac{H_{34}^{1n_z}}{\Delta_{1n_z}^{lh}} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.28})$$

$\Delta_{1n_z}^{ll}$ 表示第一和第 n_z 个轻空穴子带间能量差, $\Delta_{1n_z}^{lh}$ 是第一个轻空穴子带和第 n_z 个重空穴子带间的能量差。

A.4 利用对称性分析得到电子以及轻重空穴的自旋轨道耦合形式

在第 3 章中我们给出了 (111) GaAs 量子阱中电子以及轻重空穴的自旋轨道耦合形式 [参见公式 (3.2)-(3.4), (3.8)-(3.9), (3.12)-(3.13)], 非常有意思的是 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合可以发生相消, 对电子和轻空穴而言自旋轨道耦合的平面内分量只能在某一特殊的动量圈上严格相消而重空穴自旋轨道耦合的平面内分量却几乎可以完全相消。这里我们利用对称性分析来看一下 Dresselhaus 和 Rashba 自旋轨道耦合为何可以相消以及为什么电子跟轻空穴的相消方式相同但与重空穴的不同。

在没有外加电场的时候, (111) GaAs 量子阱的对称点群为 C_{3v} [368], 它的特征标表如表 1-1 所示, 很明显体系不具有中心反演对称会诱导出 Dresselhaus 自旋轨道耦合。我们发现当施加一个沿着量子阱生长方向的外加电场后体系的对称性没有发生任何改变, 这意味着外加电场引起的 Rashba 自旋轨道耦合跟体系中原来的 Dresselhaus 自旋轨道耦合具有完全相同的哈密顿量形式即完全相同的动量依赖, 这就解释了为何两个自旋轨道耦合可以相消。

表 1-1: C_{3v} 点群的特征标表。

	e	$2C_3$	$3\sigma_v$	基函数
A_1	1	1	1	$x^2 + y^2; x(x^2 - 3y^2)$
A_2	1	1	-1	$\sigma_z; J_z; y(3x^2 - y^2)$
E	2	-1	0	$(x, y); (x^2 - y^2, -2xy); (\sigma_y, -\sigma_x); (J_y, -J_x)$

下面来具体分析一下电子和轻重空穴的自旋轨道耦合形式。先来看一下电子和轻空穴的情况, 两者自旋分量都为 $1/2, -1/2$, 在对称性上完全等价。对称性分析的核心思想就是构造不变量, 对于自旋轨道耦合的 z 分量而言, 只有动量的立方项 $\sigma_z k_y (3k_x^2 - k_y^2)$ 是一个不变量而线性项是被严格禁戒的。对于平面内分量而言, 由于 $(\sigma_y, -\sigma_x)$ 属于 E , 只能用同样属于 E 的 (k_x, k_y) 来构造不变量, 通过简单计算可知不变量的形式为 $-k_y \sigma_x + k_x \sigma_y$ (线性项) 和 $-k^2 k_y \sigma_x + k^2 k_x \sigma_y$ (立方项), 这里只考虑了动量的奇次方项的贡献, 偶次方项被时间反演对称性禁戒掉了。因此, 电子和轻空穴的自旋轨道耦合形式为 $c_1(-k_y \sigma_x + k_x \sigma_y) + c_2(-k^2 k_y \sigma_x + k^2 k_x \sigma_y) + c_3 \sigma_z k_y (3k_x^2 - k_y^2)$, 这跟之前给出的公式 (3.2)-(3.4) 和 (3.12)-(3.13) 相比, Dresselhaus 项的形式完全相同但 Rashba 项的形式略有不同, 对电子而言公式 (3.2)-(3.4) 中没有考虑立方项而对轻空穴而言公式 (3.13) 中忽略了线性项的贡献。

再来看一下重空穴的情况, 重空穴的自旋分量为 $3/2, -3/2$, 当约化到 2×2 的子空间的时候自旋的对称性跟电子和轻空穴的不同, 此时 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 分别由 $J_x^3 - J_y^2 J_x - J_x J_y^2 - J_y J_x J_y, J_x^2 J_y - J_y^3 + J_x J_y J_x + J_y J_x^2, J_z$ 约化而来, $J_{x,y,z}$ 是自旋为 $3/2$ 的角动量矩阵。通过计算可知, $\sigma_{x,z}$ 属于 A_2 , σ_y 属于 A_1 , 其中 $\sigma_{x,y}$ 的对称性跟电子和轻空穴中的情况完全不同。不变量的具体形式为 $\sigma_x k_y (3k_x^2 - k_y^2)$, $\sigma_y k_x (k_x^2 - 3k_y^2)$ 以及 $\sigma_z k_y (3k_x^2 - k_y^2)$, 需要特别指出的是线性项是被严格禁戒的。因此重空穴的自旋轨道耦合形式为 $c_4 \sigma_x k_y (3k_x^2 - k_y^2) + c_5 \sigma_y k_x (k_x^2 - 3k_y^2) + c_6 \sigma_z k_y (3k_x^2 - k_y^2)$, 这跟之前给出的公式 (3.12)-(3.13) 中的形式完全相同。

附录B 双层石墨烯中最低导带电子的自旋轨道耦合

双层石墨烯中最低导带在 Dirac 点附近的自旋轨道耦合可以用一个 2×2 的哈密顿量来描述

$$H_{\text{eff}\mu}^{\text{SO}} = \begin{pmatrix} H_{\mu 11}^{\text{SO}} & H_{\mu 12}^{\text{SO}} \\ H_{\mu 12}^{\text{SO}*} & H_{\mu 22}^{\text{SO}} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

这里的基为 $\psi_{\mathbf{k}s}^{\mu} = \psi_{\mathbf{k}}^{\mu} \otimes |s\rangle$, $s = \{\uparrow, \downarrow\}$, $\psi_{\mathbf{k}}^{\mu} = \sum_i c_i^{\mu}(\mathbf{k}) \Psi_i^{\mu}(\mathbf{k})$ ($i = A_1, B_1, A_2, B_2$), 系数 $c_i^{\mu}(\mathbf{k})$ 可以通过严格对角化 4×4 有效哈密顿量 [参见公式 (4.2)] 得到。具体地,

$$H_{\mu 11}^{\text{SO}} = \sum_{i,j} c_i^{\mu*}(\mathbf{k}) c_j^{\mu}(\mathbf{k}) \langle \Psi_{i,\uparrow}^{\mu} | H_{\text{SO}} | \Psi_{j,\uparrow}^{\mu} \rangle, \quad (\text{B.2})$$

$$H_{\mu 22}^{\text{SO}} = \sum_{i,j} c_i^{\mu*}(\mathbf{k}) c_j^{\mu}(\mathbf{k}) \langle \Psi_{i,\downarrow}^{\mu} | H_{\text{SO}} | \Psi_{j,\downarrow}^{\mu} \rangle, \quad (\text{B.3})$$

$$H_{\mu 12}^{\text{SO}} = \sum_{i,j} c_i^{\mu*}(\mathbf{k}) c_j^{\mu}(\mathbf{k}) \langle \Psi_{i,\uparrow}^{\mu} | H_{\text{SO}} | \Psi_{j,\downarrow}^{\mu} \rangle, \quad (\text{B.4})$$

其中 $\langle \Psi_{i,s_1}^{\mu} | H_{\text{SO}} | \Psi_{j,s_2}^{\mu} \rangle$ ($s_{1,2} = \{\uparrow, \downarrow\}$) 表示 Dirac 点附近自旋空间中的自旋轨道耦合矩阵元 [179], 如表 2-1 所示。通过简单计算可以得到

$$H_{\mu 11}^{\text{SO}} = \mu \lambda_{11} (|c_3^{\mu}|^2 - |c_2^{\mu}|^2) + \mu \lambda_{12} (|c_1^{\mu}|^2 - |c_4^{\mu}|^2) \quad (\text{B.5})$$

$$H_{\mu 22}^{\text{SO}} = -H_{\mu 11}^{\text{SO}} \quad (\text{B.6})$$

$$\begin{aligned} H_{\mu 12}^{\text{SO}} = & \frac{\mu + 1}{2} [c_1^{\mu*} c_3^{\mu}(i\lambda_4) + c_2^{\mu*} c_1^{\mu}(-i\lambda_0) + c_2^{\mu*} c_4^{\mu}(-i\lambda'_4) \\ & + c_3^{\mu*} c_2^{\mu}(-i\lambda_3) + c_4^{\mu*} c_3^{\mu}(i\lambda'_0)] + \frac{\mu - 1}{2} [c_3^{\mu*} c_1^{\mu}(i\lambda_4) \\ & + c_1^{\mu*} c_2^{\mu}(-i\lambda_0) + c_4^{\mu*} c_2^{\mu}(-i\lambda'_4) + c_2^{\mu*} c_3^{\mu}(-i\lambda_3) + c_3^{\mu*} c_4^{\mu}(i\lambda'_0)]. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

此时, 公式 (4.3) 中自旋轨道耦合的有效磁场 $\Omega^{\mu}(\mathbf{k})$ 可以用 $\Omega_x^{\mu}(\mathbf{k}) = 2\text{Re}H_{\mu 12}^{\text{SO}}$, $\Omega_y^{\mu}(\mathbf{k}) = -2\text{Im}H_{\mu 12}^{\text{SO}}$ 以及 $\Omega_z^{\mu}(\mathbf{k}) = 2H_{\mu 11}^{\text{SO}}$ 来表示。我们在典型的电场 $E_z = 0.14$ V/nm 下计算了在 Dirac 点附近最低导带的自旋劈裂随动量的变化, 发现在 Dirac 点处平面内分量严格为零而平面外分量为有限值, 表明平面外分量中存在动量的零阶项而平面内分量中动量的零阶项是被禁戒的, 这是由对称性决定的会在下面详细讨论。另外, 在动量比较大的时候平面内和平面外分量都随动量变大而减小, 这跟半导体 (随动量变大而变大) [7]和单层石墨烯 (对动量的变化不敏感) [104]中很不一样。

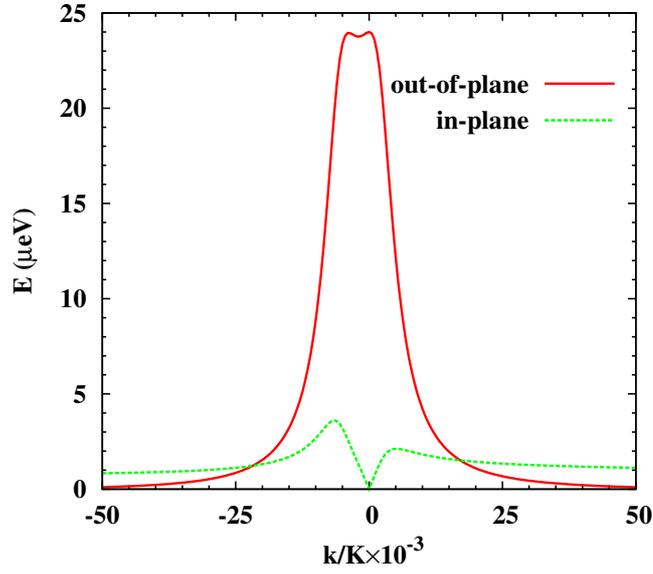


图 2-1: 在 Dirac 点附近最低导带的自旋劈裂随动量的变化, 红色实线和绿色点线分别对应自旋轨道耦合的平面外和平面内分量, 电场 $E_z = 0.14$ V/nm。摘自文献 [170]。

表 2-1: 在 K 点处, 自旋轨道耦合在赝自旋空间中的矩阵元, 这里考虑了外加电场的影响。摘自文献 [179]。

SOC	$\Psi_{A1,\uparrow}$	$\Psi_{A1,\downarrow}$	$\Psi_{B1,\uparrow}$	$\Psi_{B1,\downarrow}$	$\Psi_{A2,\uparrow}$	$\Psi_{A2,\downarrow}$	$\Psi_{B2,\uparrow}$	$\Psi_{B2,\downarrow}$
$\Psi_{A1,\uparrow}$	λ_{I2}	0	0	0	0	$i\lambda_4$	λ_1	0
$\Psi_{A1,\downarrow}$	0	$-\lambda_{I2}$	$i\lambda_0$	0	0	0	0	$-\lambda_1$
$\Psi_{B1,\uparrow}$	0	$-i\lambda_0$	$-\lambda_{I1}$	0	0	0	0	$-i\lambda'_4$
$\Psi_{B1,\downarrow}$	0	0	0	λ_{I1}	$i\lambda_3$	0	0	0
$\Psi_{A2,\uparrow}$	0	0	0	$-i\lambda_3$	λ'_{I1}	0	0	0
$\Psi_{A2,\downarrow}$	$-i\lambda_4$	0	0	0	0	$-\lambda'_{I1}$	$-i\lambda'_0$	0
$\Psi_{B2,\uparrow}$	λ_1	0	0	0	0	$i\lambda'_0$	$-\lambda'_{I2}$	0
$\Psi_{B2,\downarrow}$	0	$-\lambda_1$	$i\lambda'_4$	0	0	0	0	λ'_{I2}

表 2-2: C_3 点群的特征标表, $\omega = e^{2\pi i/3}$ 。

	e	C_3	$(C_3)^2$	基函数
Γ_1	1	1	1	$x^2 + y^2; \sigma_z; (x - iy)^3; (x + iy)^3$
Γ_2	1	ω	ω^*	$\sigma_x + i\sigma_y; x + iy; (x - iy)^2; (x + iy)^4$
Γ_3	1	ω^*	ω	$\sigma_x - i\sigma_y; x - iy; (x + iy)^2; (x - iy)^4$

上面我们在数值上严格计算了双层石墨烯中最低导带的自旋轨道耦合, 但数值结果很难直观地给出自旋轨道耦合的性质。为了解决这个问题, 我们利用对称性分析来构造最低导带的自旋轨道耦合从而得到一个解析形式。当平面外电场存在的时候, 双层石墨烯在 Dirac 点处的对称点群为 C_3 [179], 它的特征标表如表 2-2 所示, 保留到动量的四次方项时不变量的形式有 $c_1\sigma_z$, $c_2\sigma_z(k_x + ik_y)^3$, $c_3\sigma_z(k_x - ik_y)^3$, $c_4(\sigma_x + i\sigma_y)(k_x - ik_y)$, $c_5(\sigma_x - i\sigma_y)(k_x + ik_y)$, $c_6(\sigma_x + i\sigma_y)(k_x + ik_y)^2$, $c_7(\sigma_x - i\sigma_y)(k_x - ik_y)^2$, $c_8(\sigma_x + i\sigma_y)(k_x - ik_y)^4$, $c_9(\sigma_x - i\sigma_y)(k_x + ik_y)^4$, 这里需要指出的是动量的偶数次方在这里是不会被时间反演对称性禁戒掉的, 因为时间反演算符是在两个谷之间变换不会带来额外的约束条件, 这不同于前面讲的单谷系统中的情况 (参见附录 A.4)。此时体系的自旋轨道耦合是九项不变量之和, 其中动量的偶数次方需要配上谷指标比如说 $c_6\mu(\sigma_x + i\sigma_y)(k_x + ik_y)^2$, 这是时间反演操作后的结果。通过拟合前面的数值结果 [369], 我们可以得到自旋轨道耦合的解析形式 [参见公式 (4.4)-(4.6)], 自旋轨道耦合系数 $\alpha_i(k)$ ($i = 1-3$) 和 $\beta_i(k)$ ($i = 1-2$) 的具体形式为

$$\alpha_i(k) = \lambda_{11}ak \frac{\alpha_i^1 + \alpha_i^2ak + \alpha_i^3a^2k^2}{1 + \alpha_i^4ak + \alpha_i^5a^2k^2}, \quad (\text{B.8})$$

$$\beta_1(k) = \beta_1^0 + \lambda_{11}ak \frac{\beta_1^1 + \beta_1^2ak}{1 + \beta_1^3ak + \beta_1^4a^2k^2}, \quad (\text{B.9})$$

$$\beta_2(k) = \lambda_{11}ak \frac{\beta_2^1 + \beta_2^2ak}{1 + \beta_2^3ak + \beta_2^4a^2k^2}. \quad (\text{B.10})$$

这里, 系数 $\beta_1^0 = -24 \mu\text{eV}$, 跟外加电场无关, 其它系数 α_i^j ($i = 1-3, j = 1-5$) 以及 β_i^j ($i = 1-2, j = 1-4$) 随外加电场的变化分别在图 2-2 和 2-3 中给出。最后需要说明的是在跟数值结果拟合的时候我们利用了 Padé 近似 [369], 它可以使解析结果在很大的动量范围内跟数值结果吻合得很好如第 4 章中图 4-2 中右图所示。相比之下, 如果系数中只保留到动量的线性阶, 只能在很小的动量范围内跟数值比得较好。

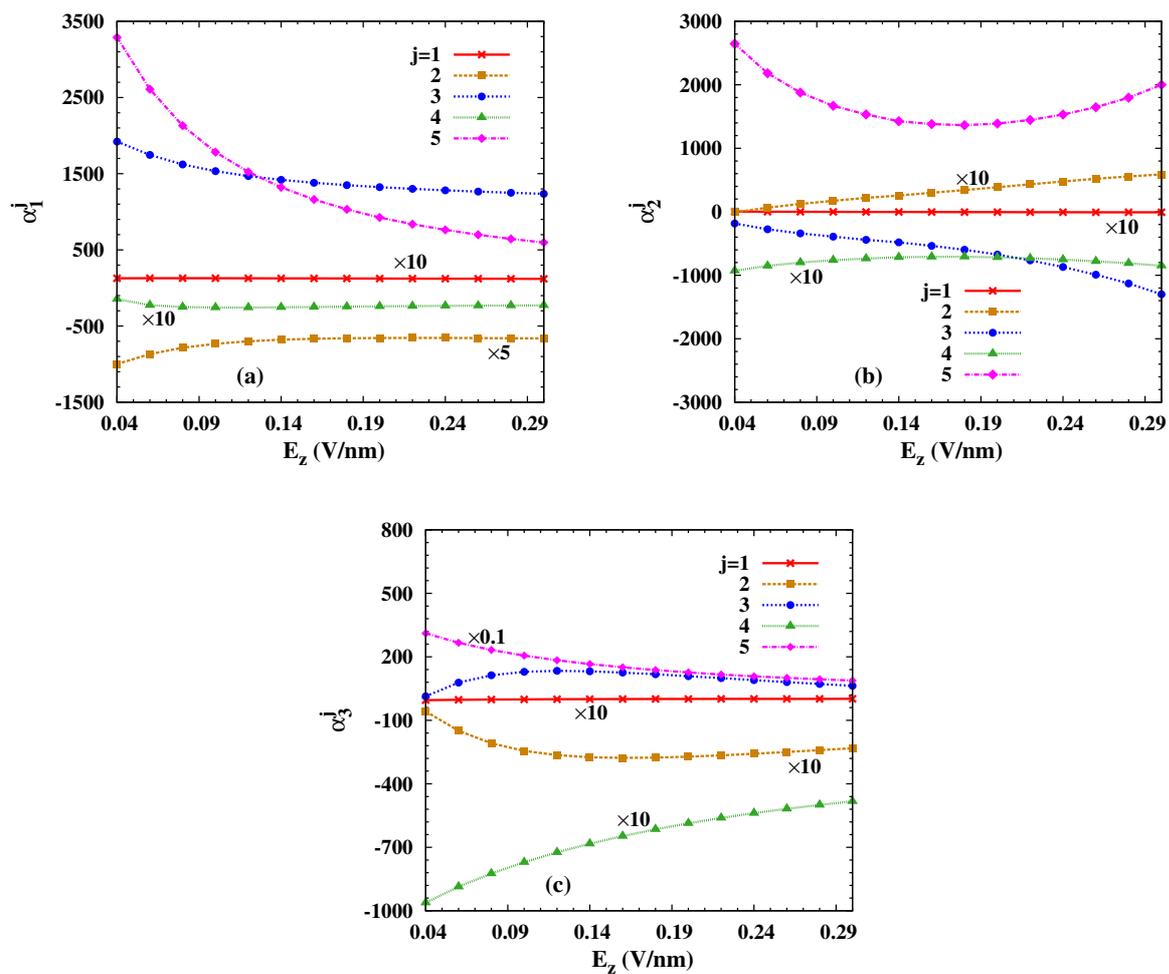


图 2-2: (a) α_1^j , (b) α_2^j 以及 (c) α_3^j 随外加电场 E_z 的变化, $j = 1-5$ 。需要指出的是这些参数都是无量纲的。摘自文献 [170]。

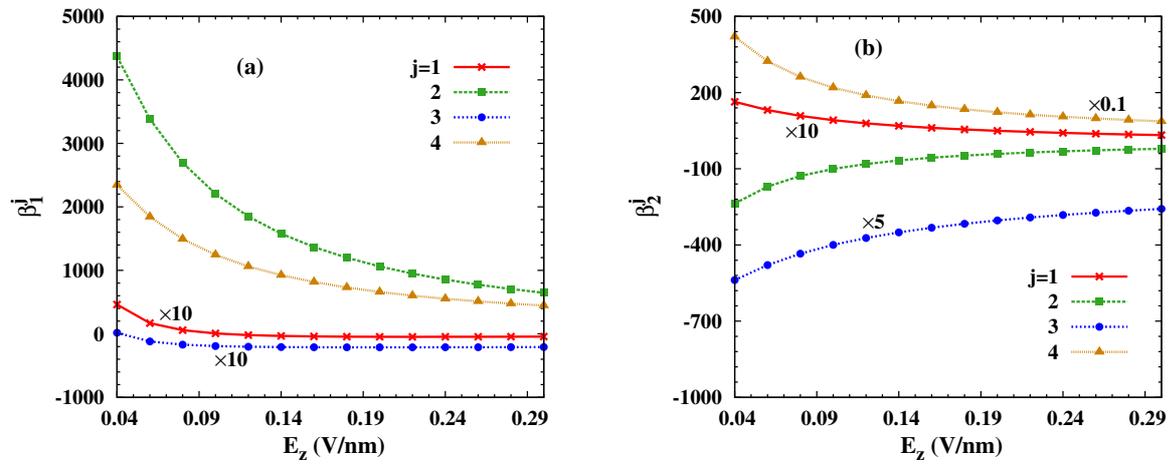


图 2-3: (a) β_1^j 和 (b) β_2^j 随外加电场的变化, $j = 1-4$ 。需要指出的是这些参数都是无量纲的。摘自文献 [170]。

附录C 单层 MoS₂ 中的一些补充说明

C.1 利用对称性分析得到单层 MoS₂ 中电子的自旋轨道耦合形式

这里我们利用对称性分析来构造单层 MoS₂ 中 K (K') 点附近最低导带的自旋轨道耦合形式。单层 MoS₂ 在 K (K') 点处的对称点群为 C_{3h} ，它的特征标表如表 3-1 所示。下面我们来构造不变量，先从镜面反演对称性 σ_h 入手，动量在二维平面内始终满足该对称性，对于自旋的泡利矩阵而言，只有 σ_z 满足而 $\sigma_{x,y}$ 均不满足，由此可知，自旋轨道耦合只有平面外 (z 方向) 分量。再考虑上动量依赖后，不变量的形式有 $c_1\sigma_z$ ， $c_2\sigma_z k^2$ ， $c_3\sigma_z(k_x + ik_y)^3$ 以及 $c_4\sigma_z(k_x - ik_y)^3$ ，这里我们只保留到动量的三次方。此时，自旋轨道耦合的形式为 $\sigma_z[\mu(c_1 + c_2k^2) + c_3(k_x + ik_y)^3 + c_4(k_x - ik_y)^3]$ ，其中 μ 是谷指标来源于时间反演对称性。

表 3-1: C_{3h} 点群的特征标表， $\omega = e^{2\pi i/3}$ 。

	e	C_3	C_3^2	σ_h	S_3	$\sigma_h C_3^2$	基函数
K_1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2; \sigma_z; (x + iy)^3; (x - iy)^3$
K_2	1	1	1	-1	-1	-1	
K_3	1	ω	ω^*	1	ω	ω^*	$x + iy; (x - iy)^2$
K_4	1	ω^*	ω	1	ω^*	ω	$x - iy; (x + iy)^2$
K_5	1	ω	ω^*	-1	$-\omega$	$-\omega^*$	$\sigma_x + i\sigma_y$
K_6	1	ω^*	ω	-1	$-\omega^*$	$-\omega$	$\sigma_x - i\sigma_y$

C.2 单层 MoS₂ 中电子-电子库仑散射导致的自旋弛豫的相关推广

在章节 5.2.2 中我们讨论了单层 MoS₂ 中平面内自旋弛豫的谷内过程，其中电子-电子库仑散射在谷内自旋弛豫中占据主导地位，它跟只依赖于动量大小的自旋轨道耦合项一起导致的自旋弛豫时间在简并区随温度的升高而减小。这里我们将自旋轨道耦合推广到更一般的情况即 $A_1 k^n \sigma_z$ ($n \geq 1$) 来研究一下电子-电子库仑散射导致的自旋弛豫。

动力学自旋 Bloch 方程在弛豫时间近似下可以写成

$$\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \frac{i}{2}[A_1 k^n \sigma_z, \rho_{\mathbf{k}}] = - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\rho_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}'}}{\tau_{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}^{ee}}, \quad (\text{C.1})$$

这里 $\tau_{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}^{ee}$ 表示由电子-电子库仑散射导致的动量散射时间。跟章节 5.2.2 中一样，我们也借助一个简单的两态模型来分析。具体来说，

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{i}{2}[A_1 k^n \sigma_z, \rho_k] = - \frac{\rho_k - \rho_{k'}}{\tau^{ee}}, \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{\partial \rho_{k'}}{\partial t} + \frac{i}{2}[A_1 k'^m \sigma_z, \rho_{k'}] = - \frac{\rho_{k'} - \rho_k}{\tau^{ee}}, \quad (\text{C.3})$$

我们令 $B_1 = A_1(k^n + k'^m)/2$ 以及 $B_2 = A_1(k^n - k'^m)/2$ 可得

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{i}{2}[(B_1 + B_2)\sigma_z, \rho_k] = - \frac{\rho_k - \rho_{k'}}{\tau^{ee}}, \quad (\text{C.4})$$

$$\frac{\partial \rho_{k'}}{\partial t} + \frac{i}{2}[(B_1 - B_2)\sigma_z, \rho_{k'}] = - \frac{\rho_{k'} - \rho_k}{\tau^{ee}}. \quad (\text{C.5})$$

在么正变换 $\rho_k = e^{-iB_1\sigma_z t/2} \tilde{\rho}_k e^{iB_1\sigma_z t/2}$ 下，上面的方程变成

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_k}{\partial t} + \frac{i}{2}B_2[\sigma_z, \tilde{\rho}_k] = - \frac{\tilde{\rho}_k - \tilde{\rho}_{k'}}{\tau^{ee}}, \quad (\text{C.6})$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_{k'}}{\partial t} - \frac{i}{2}B_2[\sigma_z, \tilde{\rho}_{k'}] = - \frac{\tilde{\rho}_{k'} - \tilde{\rho}_k}{\tau^{ee}}. \quad (\text{C.7})$$

我们定义自旋矢量 $\tilde{\mathbf{S}}_k(t) = \text{Tr}(\tilde{\rho}_k \boldsymbol{\sigma})$ ，通过简单计算可得

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}_k}{\partial t} + B_2(\tilde{\mathbf{S}}_k \times \hat{\mathbf{z}}) = - \frac{\tilde{\mathbf{S}}_k - \tilde{\mathbf{S}}_{k'}}{\tau^{ee}}, \quad (\text{C.8})$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}_{k'}}{\partial t} - B_2(\tilde{\mathbf{S}}_{k'} \times \hat{\mathbf{z}}) = - \frac{\tilde{\mathbf{S}}_{k'} - \tilde{\mathbf{S}}_k}{\tau^{ee}}. \quad (\text{C.9})$$

我们不失一般性地选取初始自旋极化沿着 x 方向，初始条件为 $\tilde{S}_k^x(0) = P_{k0}$ ， $\tilde{S}_{k'}^x(0) = P_{k'0}$ 以及 $\tilde{S}_k^y(0) = \tilde{S}_{k'}^y(0) = 0$ ，在 $|B_2|\tau^{ee} \ll 1$ 近似下上面两个方程的解具有以下形式

$$\tilde{S}_k^x + \tilde{S}_{k'}^x = (P_{k0} + P_{k'0})e^{-B_2^2\tau^{ee}t/2}, \quad (\text{C.10})$$

$$\tilde{S}_k^y + \tilde{S}_{k'}^y = (P_{k0} - P_{k'0})(e^{-B_2^2\tau^{ee}t/2} - e^{-2t/\tau^{ee}})B_2\tau^{ee}/2. \quad (\text{C.11})$$

于是，沿着 x 方向总的自旋矢量可以写成

$$\begin{aligned}
S_k^x + S_{k'}^x &= \text{Tr}[(\rho_k + \rho_{k'})\sigma_x] \\
&= \text{Tr}[e^{-iB_1\sigma_z t/2}(\tilde{\rho}_k + \tilde{\rho}_{k'})e^{iB_1\sigma_z t/2}\sigma_x] \\
&= \cos(B_1 t)(\tilde{S}_k^x + \tilde{S}_{k'}^x) - \sin(B_1 t)(\tilde{S}_k^y + \tilde{S}_{k'}^y) \\
&\approx (P_{k_0} + P_{k'_0}) \cos(B_1 t) e^{-tB_2^2\tau^{ee}/2}.
\end{aligned} \tag{C.12}$$

在简并极限下，上面总的自旋矢量可以近似为

$$S_{k_F}^x \approx P_{k_F0} \cos(A_1 k_F^n t) e^{-t/\tau_s(k_F)}, \tag{C.13}$$

其中自旋弛豫时间为 $\tau_s(k_F) = 2/(B_2^2\tau_{k_F}^{ee})$ 。考虑到 $|\epsilon_k - \epsilon_{k'}| \sim k_B T$ ，我们有 $|B_2| = A_1|k^n - k'^n|/2 = A_1 n k_F^{n-1}|k - k'|/2 \approx A_1 n k_F^{n-2} m^* k_B T/2$ ，此时自旋弛豫时间变为 $\tau_s(k_F) = 8/(A_1^2 n^2 m^{*2} k_F^{2n-4} k_B^2 T^2 \tau_{k_F}^{ee})$ 。这里， k_F 和 k_B 分别表示费米波矢以及 Boltzmann 常数。需要指出的是非均匀扩展 $[A_1^2 n^2 m^{*2} k_F^{2n-4} k_B^2 T^2/8]$ 正比于 T^2 ，与 n 的取值无关。此外在简并极限下，电子-电子库仑散射导致的动量散射率为 $1/\tau_{k_F}^{ee} \propto \ln(E_F/k_B T) T^2/E_F$ ，其中 E_F 表示费米能 [92]。因此，自旋弛豫时间 $\tau_s(k_F) \propto \ln(E_F/k_B T)/E_F$ ，它随温度的升高而减小，这个结论对 $n \geq 1$ 都成立。

附录D 对第 8 章的一些补充说明

D.1 BdG 哈密顿量 $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ [公式 (8.11)] 的能隙闭合条件

在章节 8.2.2 中我们指出 BdG 哈密顿量 $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ [公式 (8.11)] 的能隙闭合条件可以通过计算它的行列式为零得到，即 $\det(H_{\text{BdG}}) = 0$ 。能隙在动量为 Γ ， M 和 K 的时候闭合。具体来说，在 Γ 点，Rashba 自旋轨道耦合为零 [见公式 (8.4)]，这跟半导体中的情况很类似 [287, 289]。通过简单计算易得能隙闭合条件为 $(\mu \pm 3t)^2 = V_z^2 - \Delta^2$ ，其中 $+$ ($-$) 表示的是 Γ 点能量较低 (较高) 的带。对于 M 点而言，Rashba 自旋轨道耦合不会引起自旋劈裂，但会使得自旋简并的带有一个能量平移，这在后面计算得到的能隙闭合条件中可以看出。 M 点有三个不等价点，这里我们以 $M = (0, \frac{2\sqrt{3}\pi}{3})$ 为例，哈密顿量为

$$H_{\text{BdG}}(M) = \begin{pmatrix} -\mu + V_z & -w^*t & 0 & -2iw^*\lambda & \Delta & 0 & 0 & 0 \\ -wt & -\mu + V_z & 2iw\lambda & 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 \\ 0 & -2iw^*\lambda & -\mu - V_z & -w^*t & 0 & 0 & \Delta & 0 \\ -2iw\lambda & 0 & -wt & -\mu - V_z & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ \Delta & 0 & 0 & 0 & \mu + V_z & w^*t & 0 & 2iw^*\lambda \\ 0 & \Delta & 0 & 0 & wt & \mu + V_z & -2iw\lambda & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & 2iw^*\lambda & \mu - V_z & w^*t \\ 0 & 0 & 0 & \Delta & -2iw\lambda & 0 & wt & \mu - V_z \end{pmatrix}, \quad (\text{D.1})$$

其中 $w = \frac{\sqrt{3}i+1}{2}$ 。为了方便计算，我们对该哈密顿量做一个么正变换 $\tilde{H}_{\text{BdG}}(M) = U_M^\dagger H_{\text{BdG}}(M) U_M$ ， U_M 为么正变化矩阵， $\tilde{H}_{\text{BdG}}(M)$ 是变换后的哈密顿量，具体形式如

下,

$$U_M = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & w^* & 0 & -w^* & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ w^* & 0 & -w^* & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w^* & 0 & -w^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & w^* & 0 & -w^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.2})$$

$$\tilde{H}_{\text{BdG}}(M) = \begin{pmatrix} -t_+ - V_z & 0 & 0 & -2i\lambda & \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_+ + V_z & -2i\lambda & 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 \\ 0 & 2i\lambda & t_- - V_z & 0 & 0 & 0 & \Delta & 0 \\ 2i\lambda & 0 & 0 & t_- + V_z & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ \Delta & 0 & 0 & 0 & t_+ - V_z & 0 & 0 & 2i\lambda \\ 0 & \Delta & 0 & 0 & 0 & t_+ + V_z & 2i\lambda & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & -2i\lambda & -t_- - V_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta & -2i\lambda & 0 & 0 & -t_- + V_z \end{pmatrix} \quad (\text{D.3})$$

这里 $t_{\pm} = t \pm \mu$ 。当 $\mu \sim t$ 的时候, 哈密顿量中对角项为 $-t_{\pm} \mp V_z$ 和 $t_{\pm} \mp V_z$ 的部分能量很高远离能量零点, 此时能隙闭合主要是由哈密顿量中剩下的部分决定的, 我们可以用块对角化的方法得到这部分的有效哈密顿量 [86, 242],

$$H_{\text{eff}}^M = \begin{pmatrix} t_- - V_z + \frac{2\lambda^2}{t-V_z} & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & t_- + V_z + \frac{2\lambda^2}{t+V_z} & 0 & \Delta \\ \Delta & 0 & -t_- - V_z - \frac{2\lambda^2}{t+V_z} & 0 \\ 0 & \Delta & 0 & -t_- + V_z + \frac{2\lambda^2}{-t+V_z} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.4})$$

这里假设 $|\lambda| \ll t$ 。此时, 能隙闭合条件为 $(t_- - V_z + \frac{2\lambda^2}{t-V_z})(-t_- - V_z - \frac{2\lambda^2}{t+V_z}) - \Delta^2 = 0$ 和 $(t_- + V_z + \frac{2\lambda^2}{t+V_z})(-t_- + V_z - \frac{2\lambda^2}{-t+V_z}) - \Delta^2 = 0$ 。考虑到 $|V_z| \ll t$, 两个能隙闭合条件都近似为 $(t_- + \frac{2\lambda^2}{t})^2 = V_z^2 - \Delta^2$ 。 $2\lambda^2/t$ 就是前面提到的由自旋轨道耦合引起的能量平移, 考虑到 $|\lambda| \ll t$, 这个能量平移可以忽略, 能隙闭合条件变成 $t_-^2 = V_z^2 - \Delta^2$ 。通过类似的方法, 我们计算得到 M 点处当 $\mu \sim -t$ 的时候, 能隙闭合条件为 $t_+^2 = V_z^2 - \Delta^2$ 。

与 Γ 和 M 点处的情况不同, Rashba 自旋轨道耦合在 Dirac 点处可以引起一个自旋

劈裂。我们以 K 点为例来具体看一下能隙闭合条件，哈密顿量为

$$H_{\text{BdG}}(K) = \begin{pmatrix} -\mu + V_z & 0 & 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mu + V_z & -3i\lambda & 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 \\ 0 & 3i\lambda & -\mu - V_z & 0 & 0 & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mu - V_z & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ \Delta & 0 & 0 & 0 & \mu + V_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta & 0 & 0 & 0 & \mu + V_z & 3i\lambda & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & -3i\lambda & \mu - V_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & 0 & \mu - V_z \end{pmatrix}, \quad (\text{D.5})$$

它可以被分成两个独立的 4×4 部分，用 $H_{1,2}$ 来标记，其中 H_1 (H_2) 中没有 (有) Rashba 自旋轨道耦合项。 H_2 中存在非零的 Rashba 自旋轨道耦合项，能隙始终是打开的，对能隙闭合没有贡献。对于 H_1 而言，

$$H_1 = \begin{pmatrix} -\mu + V_z & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & -\mu - V_z & 0 & \Delta \\ \Delta & 0 & \mu + V_z & 0 \\ 0 & \Delta & 0 & \mu - V_z \end{pmatrix}, \quad (\text{D.6})$$

这跟 Rashba 自旋轨道耦合，外加磁场和近邻引入的 s 波超导配对共同作用下的半导体在 Γ 点处的哈密顿量完全一样 [287, 289]。这意味着它们有相同的能隙闭合条件 $V_z^2 = \mu^2 + \Delta^2$ 。在 K' 点处也可以做类似的分析，能隙闭合条件跟 K 点处相同。

D.2 zigzag 和 armchair 边界的石墨烯纳米带中 Majorana 边界态的计算方法

我们研究了 zigzag 和 armchair 边界的石墨烯纳米带在 Dirac 点附近的 Majorana 边界态。我们先来看一下 zigzag 边界的情况。在纳米带中先选择一个原胞（跟文献 [370] 中一样）然后再沿着平行于边界的方向，不妨设为 x 轴，做一个傅氏变换可以得到

体系的哈密顿量,

$$\begin{aligned}
H_{\text{zigzag}} = & -t \sum_{k_x} \sum_{\langle j_1, j_2 \rangle \sigma} [1 + |\text{sgn}(x_{j_2} - x_{j_1})| e^{ik_x \text{sgn}(x_{j_2} - x_{j_1})}] c_{k_x j_1 \sigma}^\dagger c_{k_x j_2 \sigma} \\
& + \sum_{k_x} \sum_{j \sigma} (\sigma V_z - \mu) c_{k_x j \sigma}^\dagger c_{k_x j \sigma} + \Delta \sum_{k_x} \sum_j (c_{k_x j \uparrow}^\dagger c_{-k_x j \downarrow}^\dagger + \text{H.c.}) \\
& + i\lambda \sum_{k_x} \sum_{\langle j_1, j_2 \rangle \sigma \sigma'} [(\sigma_x^{\sigma \sigma'} d_{j_1 j_2}^y - \sigma_y^{\sigma \sigma'} d_{j_1 j_2}^x) + |\text{sgn}(x_{j_2} - x_{j_1})| e^{ik_x \text{sgn}(x_{j_2} - x_{j_1})}] \\
& \times (\sigma_x^{\sigma \sigma'} d_{j_1 j_2}^y + \sigma_y^{\sigma \sigma'} d_{j_1 j_2}^x) c_{k_x j_1 \sigma}^\dagger c_{k_x j_2 \sigma'} \quad (\text{D.7})
\end{aligned}$$

这里 $x_{j_2} - x_{j_1}$ 表示原胞中第 j_2 个和第 j_1 个原子在 x 方向的相对位置, sgn 是数学上的符号函数。通过严格对角化哈密顿量 H_{zigzag} 可以得到本征值以及本征态。这种方法只能处理纳米带比较窄的情况, 当纳米带变得很宽 (在我们的计算中原胞内的原子数目需要达到 10^4 的量级) 的时候, 由于受计算机内存, 计算速度等限制, 该方法使用起来很不方便。我们转而寻找其它方法来替代。只包含跃迁项的石墨烯纳米带在 Dirac 点附近是有解析解的 [124], 本征态具有以下形式

$$\Psi_{\tau k_x}^{z, \varepsilon}(\mathbf{r}) = A e^{i(\tau|K| + k_x)x} \begin{pmatrix} -v_f [(z - \tau k_x) e^{zy} + (z + \tau k_x) e^{-zy}] / \varepsilon \\ e^{zy} - e^{-zy} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.8})$$

其中本征值 ε 满足 $\varepsilon^2 = v_f^2(k_x^2 - z^2)$, $A = \sqrt{\frac{\sqrt{3}}{2(e^{2zL} - e^{-2zL})/z - 8L}}$ 。 L 是纳米带的宽度, z 由方程 $e^{-2zL} = (k_x + \tau z)/(k_x - \tau z)$ 决定的, 需要指出的是如果 z_0 是这个方程的解, $-z_0$ 也是, 这两个态是等价的, 在实际计算中只需要取其中一个即可。我们可以在上述本征态的基础上把自旋和粒子-空穴自由度考虑进来构造出一个完备基, 在这个完备基下可以计算出哈密顿量 H_{zigzag} 的矩阵元, 通过对角化哈密顿量矩阵元可以得到体系的能谱和波函数, 其中零能态就是 Majorana 边界态。

接下来我们研究一下 armchair 边界的石墨烯纳米带的情况, 哈密顿量为

$$\begin{aligned}
H_{\text{armchair}} = & -t \sum_{k_x} \sum_{\langle j_1, j_2 \rangle \sigma} c_{k_x j_1 \sigma}^\dagger c_{k_x j_2 \sigma} + \sum_{k_x} \sum_{j \sigma} (\sigma V_z - \mu) c_{k_x j \sigma}^\dagger c_{k_x j \sigma} \\
& + \Delta \sum_{k_x} \sum_j (c_{k_x j \uparrow}^\dagger c_{-k_x j \downarrow}^\dagger + \text{H.c.}) + i\lambda \sum_{k_x} \sum_{\langle j_1, j_2 \rangle \sigma \sigma'} (\sigma_x^{\sigma \sigma'} d_{j_1 j_2}^y - \sigma_y^{\sigma \sigma'} d_{j_1 j_2}^x) c_{k_x j_1 \sigma}^\dagger c_{k_x j_2 \sigma'} \\
& - t \sum_{k_x} \sum_{j_1^* j_2^* \sigma} [e^{i\sqrt{3}k_x} (\delta_{j_1^*, j_2^*} + \delta_{j_1^*+1, j_2^*}) c_{k_x j_1^* \sigma}^\dagger c_{k_x j_2^* \sigma} + \text{H.c.}] + i\lambda \sum_{k_x} \sum_{j_1^* j_2^* \sigma \sigma'} \{e^{i\sqrt{3}k_x} \\
& \times [\delta_{j_1^*+1, j_2^*} (\frac{\sqrt{3}}{2} \sigma_x^{\sigma \sigma'} - \frac{1}{2} \sigma_y^{\sigma \sigma'}) - \delta_{j_1^*, j_2^*} (\frac{\sqrt{3}}{2} \sigma_x^{\sigma \sigma'} + \frac{1}{2} \sigma_y^{\sigma \sigma'})] c_{k_x j_1^* \sigma}^\dagger c_{k_x j_2^* \sigma'} + \text{H.c.}\}, \quad (\text{D.9})
\end{aligned}$$

其中沿着边界的方向设为 x 轴, j_1^* (j_2^*) 表示原胞中第一 (四) 列的第 j_1^* (j_2^*) 个原子。需要说明的是原胞的选择跟文献 [370] 中的一样。与上面 zigzag 边界的石墨烯纳米带中

的情况类似，我们先解析求解只有跃迁项的 armchair 边界的石墨烯纳米带在 Dirac 点附近的本征值和本征态。本征态可以写成

$$\Psi_{k_x}^{k_n, \varepsilon}(\mathbf{r}) = 2Ae^{ik_x x} \sin[(|K| + k_n)y] \begin{pmatrix} -v_f(k_x - ik_n)/\varepsilon \\ i \end{pmatrix}, \quad (\text{D.10})$$

本征值 ε 满足 $\varepsilon^2 = v_f^2(k_x^2 + k_n^2)$, $k_n = n\pi/L - |K|$, $A = \frac{1}{\sqrt{8L}}$ 。在这些本征态的基础上把自旋和粒子-空穴自由度考虑进来就可以构造一个完备基，在这个完备基下可以计算出哈密顿量 H_{armchair} 的矩阵元，通过对角化哈密顿量矩阵可以得到 armchair 边界的石墨烯纳米带的能谱和波函数如图 4-1 所示。在图 4-1 (a) 中，我们发现体系有八个零能态，对应每个边界各有四个 Majorana 费米子，这跟 zigzag 边界中的情况一样，都是由 Chern 数 $C_1 = 4$ 决定的。我们选择了局域在同一边界的两个 Majorana 边界态给出了它们的实空间几率幅，具有较小（较大）动量 $|k_x|$ ($k_x < 0$) 的 Majorana 费米子对应的是图 4-1 (b) ((c))，两个边界态都表现出明显的震荡衰减的行为，但是衰减长度和震荡周期都不相同。

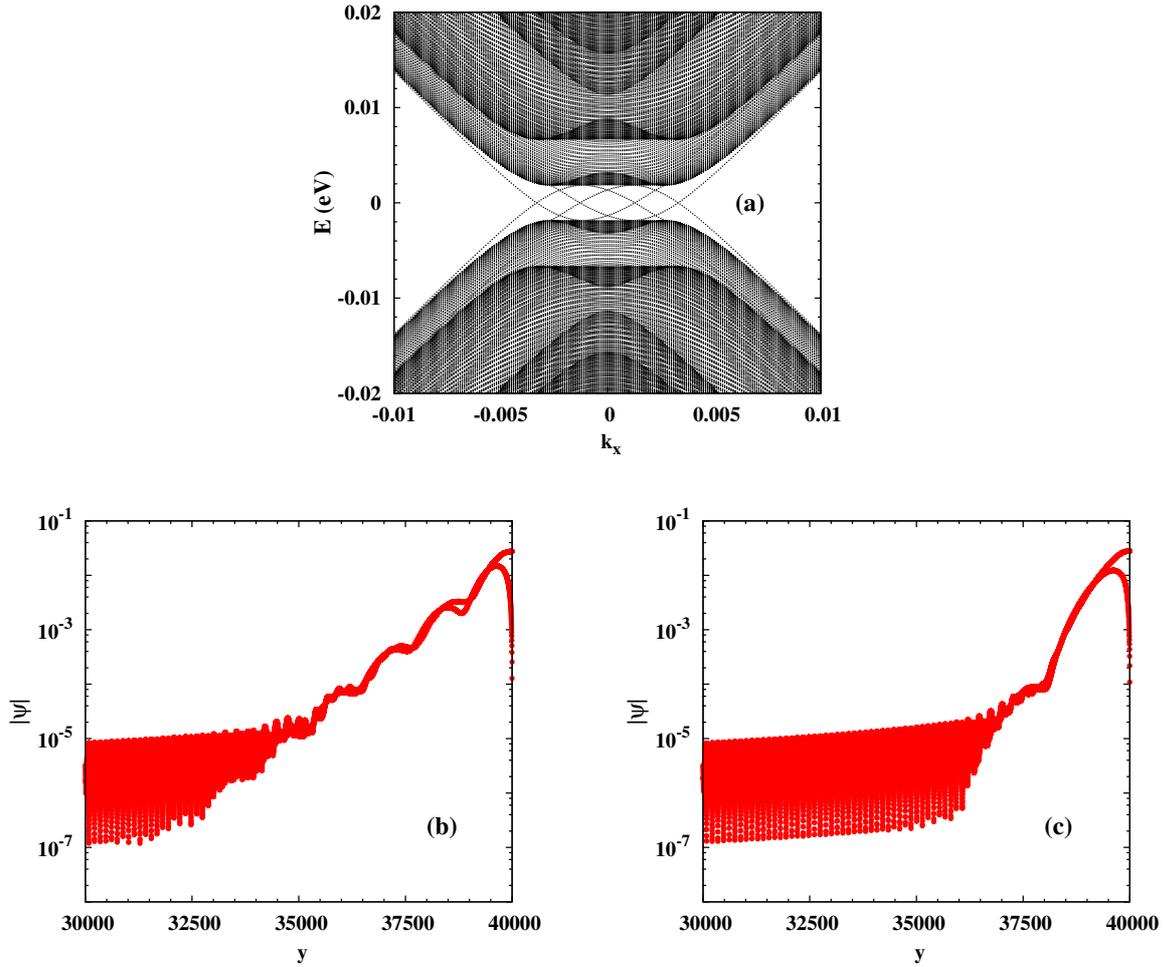


图 4-1: (a) armchair 边界的石墨烯纳米带的能谱。这里考虑了 Rashba 自旋轨道耦合，交换场以及近邻引入的 s 波超导配对。(b) ((c)) 表示局域在同一边界，具有较小（较大）动量 $|k_x|$ ($k_x < 0$) 的 Majorana 边界态波函数的实空间几率幅 $|\psi|$ 。这里只给出了靠近 $y = 40000$ 的一边。波函数几率幅在离边界较远的地方会有一些涨落，这些涨落来自于数值误差。参数选择为 $V_z = 6$ meV, $\lambda = 4$ meV, $\mu = 2$ meV, $\Delta = 2$ meV。摘自文献 [328]。

参考文献

- [1] 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).
- [2] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [3] F. Meier and B. P. Zakharchenya, *Optical Orientation* (North-Holland, Amsterdam, 1984).
- [4] *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*, edited by D. D. Awschalom, D. Loss, and N. Samarth (Springer-Verlag, Berlin, 2002).
- [5] *Spin Physics in Semiconductors*, edited by M. I. D'yakonov (Springer, Berlin, 2008).
- [6] J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, and I. Žutić, *Acta Phys. Slov.* **57**, 565 (2007).
- [7] M. W. Wu, J. H. Jiang, and M. Q. Weng, *Phys. Rep.* **493**, 61 (2010).
- [8] T. Korn, *Phys. Rep.* **494**, 415 (2010).
- [9] *Handbook of Spin Transport and Magnetism*, edited by E. Y. Tsymlal and I. Žutić (Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, 2011).
- [10] D. D. Awschalom, M. E. Flatté, and N. Samarth, *Scientific American* **286**, 66 (2002).
- [11] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
- [12] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn, *Phys. Rev. B* **39**, 4828 (1989).
- [13] J. Barnaś, A. Fuss, R. E. Camley, P. Grünberg, and W. Zinn, *Phys. Rev. B* **42**, 8110 (1990).
- [14] C. Dupas, P. Beauvillain, C. Chappert, J. P. Renard, F. Trigui, P. Veillet, E. Vélú, and D. Renard, *J. Appl. Phys.* **67**, 5680 (1990).
- [15] T. Shinjo and H. Yamamoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **59**, 3061 (1990).
- [16] B. Dieny, V. S. Speriosu, S. S. P. Parkin, B. A. Gurney, D. R. Wilhoit, and D. Mauri, *Phys. Rev. B* **43**, 1297(R) (1991).
- [17] R. von Helmolt, J. Wecker, B. Holzapfel, L. Schultz, and K. Samwer, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2331 (1993).
- [18] 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).
- [19] J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong, and R. Meservey, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3273 (1995).
- [20] T. Miyazaki and N. Tezuka, *J. Magn. Magn. Mater.* **151**, 403 (1995).
- [21] S. Ikeda, J. Hayakawa, Y. Ashizawa, Y. M. Lee, K. Miura, H. Hasegawa, M. Tsunoda, F. Matsukura, and H. Ohno, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 082508 (2008).

-
-
- [22] S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [23] C. Ciuti, J. P. McGuire, and L. J. Sham, Appl. Phys. Lett. **81**, 4781 (2002).
- [24] J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss, Phys. Rev. Lett. **90**, 146801 (2003).
- [25] B. Wang, J. Wang, and H. Guo, Phys. Rev. B **67**, 092408 (2003).
- [26] K. C. Hall, W. H. Lau, K. Gündoğdu, and M. E. Flatté, Appl. Phys. Lett. **83**, 2937 (2003).
- [27] M. G. Pala, M. Governale, J. König, U. Zülicke, and G. Iannaccone, Phys. Rev. B **69**, 045304 (2004).
- [28] K. C. Hall and M. E. Flatté, Appl. Phys. Lett. **88**, 162503 (2006).
- [29] H. C. Koo, J. H. Kwon, J. Eom, J. Chang, S. H. Han, and M. Johnson, Science **325**, 1515 (2009).
- [30] M. E. Flatté and G. Vignale, Appl. Phys. Lett. **78**, 1273 (2001).
- [31] M. E. Flatté and G. Vignale, J. Appl. Phys. **97**, 104508 (2005).
- [32] M. Deutsch, G. Vignale, and M. E. Flatté, J. Appl. Phys. **96**, 7424 (2004).
- [33] J. Fabian, I. Žutić, and S. Das Sarma, Appl. Phys. Lett. **84**, 85 (2004).
- [34] J. Fabian and I. Žutić, Phys. Rev. B **69**, 115314 (2004).
- [35] J. Fabian and I. Žutić, Acta Phys. Polonica A **106**, 109 (2004).
- [36] J. Fabian and I. Žutić, Appl. Phys. Lett. **86**, 133506 (2005).
- [37] M. E. Flatté, Z. G. Yu, E. Johnston-Halperin, and D. D. Awschalom, Appl. Phys. Lett. **82**, 4740 (2003).
- [38] J. Fabian, I. Žutić, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **66**, 165301 (2002).
- [39] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **88**, 066603 (2002).
- [40] P. Chen, J. Moser, P. Kotissek, J. Sadowski, M. Zenger, D. Weiss, and W. Wegscheider, Phys. Rev. B **74**, 241302(R) (2006).
- [41] I. Appelbaum, B. Huang, and D. J. Monsma, Nature **447**, 295 (2007).
- [42] B. Huang, D. J. Monsma, and I. Appelbaum, Appl. Phys. Lett. **91**, 072501 (2007).
- [43] D. J. Monsma, J. C. Lodder, T. J. A. Popma, and B. Dieny, Phys. Rev. Lett. **74**, 5260 (1995).
- [44] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, J. Phys. C **17**, 6039 (1984).
- [45] S. Bandyopadhyay, arXiv:0911.0210.
- [46] A. N. M. Zainuddin, S. Hong, L. Siddiqui, S. Srinivasan, and S. Datta, Phys. Rev. B **84**, 165306 (2011).
- [47] P. Agnihotri and S. Bandyopadhyay, Physica E **42**, 1736 (2010).
- [48] B. Y. Sun, P. Zhang, and M. W. Wu, Semicond. Sci. Technol. **26**, 075005 (2011).
- [49] D. P. DiVincenzo, Science **270**, 255 (1995).
- [50] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University, Cambridge, NY, 2000).
- [51] X. Hu and S. Das Sarma, Phys. Rev. A **64**, 042312 (2001).
- [52] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, and L. M. K. Vandersypen, Rev. Mod. Phys. **79**, 1217 (2007).
- [53] D. Loss and D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).

-
-
- [54] F. H. L. Koppens, C. Buizert, K.-J. Tielrooij, I. T. Vink, K. C. Nowack, T. Meunier, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen, *Nature* **442**, 766 (2006).
- [55] 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).
- [56] F. H. L. Koppens, J. A. Folk, J. M. Elzerman, R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, I. T. Vink, H. P. Tranitz, W. Wegscheider, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen, *Science* **309**, 1346 (2005).
- [57] J. R. Petta, A. C. Johnson, A. Yacoby, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **72**, 161301(R) (2005).
- [58] S. Sasaki, T. Fujisawa, T. Hayashi, and Y. Hirayama, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 056803 (2005).
- [59] T. Meunier, I. T. Vink, L. H. Willems van Beveren, K.-J. Tielrooij, R. Hanson, F. H. L. Koppens, H. P. Tranitz, W. Wegscheider, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 126601 (2007).
- [60] J. L. Cheng, M. W. Wu, and C. Lü, *Phys. Rev. B* **69**, 115318 (2004).
- [61] K. Shen and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **76**, 235313 (2007).
- [62] J. H. Jiang, Y. Y. Wang, and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **77**, 035323 (2008).
- [63] J. M. Taylor, H.-A. Engel, W. Dür, A. Yacoby, C. M. Marcus, P. Zoller, and M. D. Lukin, *Nat. Phys.* **1**, 177 (2005).
- [64] R. Hanson, B. Witkamp, L. M. K. Vandersypen, L. H. Willems van Beveren, J. M. Elzerman, and L. P. Kouwenhoven, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 196802 (2003).
- [65] J. I. Climente, A. Bertoni, G. Goldoni, M. Rontani, and E. Molinari, *Phys. Rev. B* **75**, 081303(R) (2007).
- [66] F. A. Rebrodo, A. Franceschetti, and A. Zunger, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 2972 (1999).
- [67] S. J. Shin, J. J. Lee, R. S. Chuang, M. S. Kim, E. S. Park, J. B. Choi, N. S. Kim, K. H. Park, S. D. Lee, N. Kim, and J. H. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 053114 (2007).
- [68] M. Prada, R. H. Blick, and R. Joynt, *Phys. Rev. B* **77**, 115438 (2008).
- [69] N. Shaji, C. B. Simmons, M. Thalakulam, L. J. Klein, H. Qin, H. Luo, D. E. Savage, M. G. Lagally, A. J. Rumberg, R. Joynt, M. Friesen, R. H. Blick, S. N. Coopersimth, and M. A. Eriksson, *Nat. Phys.* **4**, 540 (2008).
- [70] D. Culcer, L. Cywiński, Q. Li, X. Hu, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **80**, 205302 (2009).
- [71] Q. Li, L. Cywiński, D. Culcer, X. Hu, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **81**, 085313 (2010).
- [72] D. Culcer, L. Cywiński, Q. Li, X. Hu, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **82**, 155312 (2010).
- [73] M. Xiao, M. G. House, and H. W. Jiang, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 096801 (2010).
- [74] L. Wang, K. Shen, B. Y. Sun, and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **81**, 235326 (2010).
- [75] M. Raith, P. Stano, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **83**, 195318 (2011).
- [76] S. Das Sarma, X. Wang, and S. Yang, *Phys. Rev. B* **83**, 235314 (2011).
- [77] L. Wang and M. W. Wu, *J. Appl. Phys.* **110**, 043716 (2011).
- [78] Z. Liu, L. Wang, and K. Shen, *Phys. Rev. B* **85**, 045311 (2012).
- [79] Y. F. Ren, L. Wang, Z. Liu, and M. W. Wu, *Physica E* **63**, 329 (2014).
- [80] R. J. Elliott, *Phys. Rev.* **96**, 266 (1954).

-
-
- [81] Yafet, Phys. Rev. **85**, 478 (1952).
- [82] M. I. D'yakonov and V. I. Perel', Zh. Eksp. Teor. Fiz. **60**, 1954 (1971).
- [83] G. L. Bir, A. G. Aronov, and G. E. Pikus, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **69**, 1382 (1975).
- [84] A. W. Overhauser, Phys. Rev. **89**, 689 (1953).
- [85] G. Dresselhaus, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).
- [86] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Springer, Berlin, 2003).
- [87] M. W. Wu, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 2195 (2001).
- [88] Y. Zhou, T. Yu, and M. W. Wu, Phys. Rev. B **87**, 235304 (2013).
- [89] T. Yu and M. W. Wu, Phys. Rev. A **88**, 043634 (2013).
- [90] T. Yu and M. W. Wu, Phys. Rev. B **89**, 045303 (2014).
- [91] M. W. Wu and C. Z. Ning, Eur. Phys. J. B **18**, 373 (2000).
- [92] M. M. Glazov and E. L. Ivchenko, JETP **99**, 1279 (2004).
- [93] M. Q. Weng and M. W. Wu, Phys. Rev. B **68**, 075312 (2003).
- [94] M. Q. Weng, M. W. Wu, and L. Jiang, Phys. Rev. B **69**, 245320 (2004).
- [95] M. Q. Weng and M. W. Wu, Phys. Rev. B **70**, 195318 (2004).
- [96] J. Zhou, J. L. Cheng, and M. W. Wu, Phys. Rev. B **75**, 045305 (2007).
- [97] J. Zhou and M. W. Wu, Phys. Rev. B **77**, 075318 (2008).
- [98] L. H. Teng, P. Zhang, T. S. Lai, and M. W. Wu, Europhys. Lett. **84**, 27006 (2008).
- [99] Y. Zhou, J. H. Jiang, and M. W. Wu, New J. Phys. **11**, 113039 (2009).
- [100] P. Zhang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **80**, 155311 (2009).
- [101] Y. Zhou and M. W. Wu, Europhys. Lett. **89**, 57001 (2010).
- [102] J. H. Jiang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **79**, 125206 (2009).
- [103] B. Y. Sun, P. Zhang, and M. W. Wu, J. Appl. Phys. **108**, 093709 (2010).
- [104] Y. Zhou and M. W. Wu, Phys. Rev. B **82**, 085304 (2010).
- [105] L. Wang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **89**, 115302 (2014).
- [106] X. Z. Ruan, H. H. Luo, Y. Ji, Z. Y. Xu, and V. Umansky, Phys. Rev. B **77**, 193307 (2008).
- [107] 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).
- [108] W. J. H. Leyland, R. T. Harley, M. Henini, A. J. Shields, I. Farrer, and D. A. Ritchie, Phys. Rev. B **76**, 195305 (2007).
- [109] 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).
- [110] W. J. H. Leyland, R. T. Harley, M. Henini, A. J. Shields, I. Farrer, and D. A. Ritchie, Phys. Rev. B **77**, 205321 (2008).
- [111] L. Wang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **85**, 235308 (2012).
- [112] T. Yu and M. W. Wu, Phys. Rev. B **89**, 205303 (2014).
- [113] M. Z. Maialle, E. A. de Andrada e Silva, and L. J. Sham, Phys. Rev. B **47**, 15776 (1993).
- [114] H. Tong and M. W. Wu, Phys. Rev. B **83**, 235323 (2011).
- [115] D. Lagarde, L. Bouet, X. Marie, C. R. Zhu, B. L. Liu, T. Amand, P. H. Tan, and B.

- Urbaszek, Phys. Rev. Lett. **112**, 047401 (2014).
- [116] C. Mai, A. Barrette, Y. Yu, Y. G. Semenov, K. W. Kim, L. Cao, and K. Gundogdu, Nano Lett. **14**, 202 (2014).
- [117] Q. Wang, S. Ge, X. Li, J. Qiu, Y. Ji, J. Feng, and D. Sun, ACS Nano **7**, 11087 (2013).
- [118] T. Cao, G. Wang, W. Han, H. Ye, C. Zhu, J. Shi, Q. Niu, P. Tan, E. Wang, B. Liu, and J. Feng, Nat. Commun. **3**, 887 (2012).
- [119] G. Sallen, L. Bouet, X. Marie, G. Wang, C. R. Zhu, W. P. Han, Y. Lu, P. H. Tan, T. Amand, B. L. Liu, and B. Urbaszek, Phys. Rev. B **86**, 081301(R) (2012).
- [120] A. Splendiani, L. Sun, Y. Zhang, T. Li, J. Kim, C. Y. Chim, G. Galli, and F. Wang, Nano Lett. **10**, 1271 (2010).
- [121] K. F. Mak, K. He, J. Sahn, and T. F. Heinz, Nat. Nanotech. **7**, 494 (2012).
- [122] H. Zeng, J. Dai, W. Yao, D. Xiao, and X. Cui, Nat. Nanotech. **7**, 490 (2012).
- [123] 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).
- [124] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
- [125] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).
- [126] D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and A. Brataas, Phys. Rev. B **74**, 155426 (2006).
- [127] H. Min, J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, B. R. Sahu, L. Kleinman, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **74**, 165310 (2006).
- [128] Y. Yao, F. Ye, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, and Z. Fang, Phys. Rev. B **75**, 041401(R) (2007).
- [129] J. C. Boettger and S. B. Trickey, Phys. Rev. B **75**, 121402(R) (2007).
- [130] B. Trauzettel, D. V. Bulaev, D. Loss, and G. Burkard, Nat. Phys. **3**, 192 (2007).
- [131] J. Fischer, B. Trauzettel, and D. Loss, Phys. Rev. B **80**, 155401 (2009).
- [132] M. Gmitra, S. Konschuh, C. Ertler, C. Ambrosch-Draxl, and J. Fabian, Phys. Rev. B **80**, 235431 (2009).
- [133] D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and A. Brataas, Phys. Rev. Lett. **103**, 146801 (2009).
- [134] S. Abdelouahed, A. Ernst, J. Henk, I. V. Maznichenko, and I. Mertig, Phys. Rev. B **82**, 125424 (2010).
- [135] S. Konschuh, M. Gmitra, and J. Fabian, Phys. Rev. B **82**, 245412 (2010).
- [136] C. Ertler, S. Konschuh, M. Gmitra, and J. Fabian, Phys. Rev. B **80**, 041405(R) (2009).
- [137] W. Han, R. K. Kawakami, M. Gmitra, and J. Fabian, Nat. Nanotechnol. **9**, 794 (2014).
- [138] N. Tombros, C. Józsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, Nature **448**, 571 (2007).
- [139] S. Cho, Y.-F. Chen, and M. S. Fuhrer, Appl. Phys. Lett. **91**, 123105 (2007).
- [140] C. Józsa, M. Popinciuc, N. Tombros, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, Phys. Rev. Lett. **100**, 236603 (2008).
- [141] N. Tombros, S. Tanabe, A. Veligura, C. Józsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, Phys. Rev. Lett. **101**, 046601 (2008).
- [142] C. Józsa, T. Maassen, M. Popinciuc, P. J. Zomer, A. Veligura, H. T. Jonkman, and B. J.

- van Wees, Phys. Rev. B **80**, 241403(R) (2009).
- [143] 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).
- [144] W. Han, W. H. Wang, K. Pi, K. M. McCreary, W. Bao, Y. Li, F. Miao, C. N. Lau, and R. K. Kawakami, Phys. Rev. Lett. **102**, 137205 (2009).
- [145] K. Pi, W. Han, K. M. McCreary, A. G. Swartz, Y. Li, and R. K. Kawakami, Phys. Rev. Lett. **104**, 187201 (2010).
- [146] W. Han, K. Pi, K. M. McCreary, Y. Li, J. J. I. Wong, A. G. Swartz, and R. K. Kawakami, Phys. Rev. Lett. **105**, 167202 (2010).
- [147] W. Han and R. K. Kawakami, Phys. Rev. Lett. **107**, 047207 (2011).
- [148] 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).
- [149] T. Maassen, I. J. Vera-Marun, M. H. D. Guimarães, and B. J. van Wees, Phys. Rev. B **86**, 235408 (2012).
- [150] M. Wojtaszek, I. J. Vera-Marun, T. Maassen, and B. J. van Wees, Phys. Rev. B **87**, 081402(R) (2013).
- [151] A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, A. M. Shikin, C. Biswas, E. Vescovo, A. Rybkin, D. Marchenko, and O. Rader, Phys. Rev. Lett. **101**, 157601 (2008).
- [152] A. H. Castro Neto and F. Guinea, Phys. Rev. Lett. **103**, 026804 (2009).
- [153] V. K. Dugaev, E. Y. Sherman, and J. Barnaś, Phys. Rev. B **83**, 085306 (2011).
- [154] P. Zhang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **84**, 045304 (2011).
- [155] P. Zhang and M. W. Wu, New J. Phys. **14**, 033015 (2012).
- [156] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, L. A. Ponomarenko, D. Jiang, and A. K. Geim, Phys. Rev. Lett. **97**, 016801 (2006).
- [157] J. S. Jeong, J. Shin, and H. W. Lee, Phys. Rev. B **84**, 195457 (2011).
- [158] P. Zhang, Y. Zhou, and M. W. Wu, J. Appl. Phys. **112**, 073709 (2012).
- [159] Y. S. Dedkov, M. Fonin, U. Rüdiger, and C. Laubschat, Phys. Rev. Lett. **100**, 107602 (2008).
- [160] 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).
- [161] 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).
- [162] P. Gallo, A. Arnoult, T. Camps, E. Havard, and C. Fontaine, J. Appl. Phys. **101**, 024322 (2007).
- [163] W. Han, J. R. Chen, D. Wang, K. M. McCreary, H. Wen, A. G. Swartz, J. Shi, and R. K. Kawakami, Nano Lett. **12**, 3443 (2012).
- [164] A. G. Swartz, J. R. Chen, K. M. McCreary, P. M. Odenthal, W. Han, and R. K. Kawakami, Phys. Rev. B **87**, 075455 (2013).
- [165] S. Jo, D. K. Ki, D. Jeong, H. J. Lee, and S. Kettemann, Phys. Rev. B **84**, 075453 (2011).
- [166] T. Maassen, J. J. van den Berg, N. IJbema, F. Fromm, T. Seyller, R. Yakimova, and B. J.

- van Wees, *Nano Lett.* **12**, 1498 (2012).
- [167] B. Dlubak, M.-B. Martin, C. Deranlot, B. Servet, S. Xavier, R. Mattana, M. Sprinkle, C. Berger, W. A. De Heer, F. Petroff, A. Anane, P. Seneor, and A. Fert, *Nat. Phys.* **8**, 557 (2012).
- [168] P. J. Zomer, M. H. D. Guimarães, N. Tombros, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **86**, 161416(R) (2012).
- [169] M. 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).
- [170] L. Wang and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **87**, 205416 (2013).
- [171] L. Wang and M. W. Wu, *Phys. Lett. A* **378**, 1336 (2014).
- [172] F. Yang, L. Wang, and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **92**, 155414 (2015).
- [173] O. V. Yazyev and L. Helm, *Phys. Rev. B* **75**, 125408 (2007).
- [174] J. Červenka, M. I. Katsnelson, and C. F. J. Flipse, *Nat. Phys.* **5**, 840 (2009).
- [175] K. M. McCreary, A. G. Swartz, W. Han, J. Fabian, and R. K. Kawakami, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 186604 (2012).
- [176] D. Kochan, M. Gmitra, and J. Fabian, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 116602 (2014).
- [177] D. Kochan, S. Irmer, M. Gmitra, and J. Fabian, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 196601 (2015).
- [178] S. P. Dash, S. Sharma, J. C. Le Breton, J. Peiro, H. Jaffreès, J.-M. George, A. Lemaître, and R. Jansen, *Phys. Rev. B* **84**, 054410 (2011).
- [179] S. Konschuh, M. Gmitra, D. Kochan, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **85**, 115423 (2012).
- [180] T.-Y. Yang, J. Balakrishnan, F. Volmer, A. Avsar, M. Jaiswal, J. Samn, S. R. Ali, A. Pachoud, M. Zeng, M. Popinciuc, G. Güntherodt, B. Beschoten, and B. Özyilmaz, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 047206 (2011).
- [181] M. Diez and G. Burkard, *Phys. Rev. B* **85**, 195412 (2012).
- [182] 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).
- [183] E. S. Kadantsev and P. Hawrylak, *Solid State Commun.* **152**, 909 (2012).
- [184] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102**, 10451 (2005).
- [185] A. Ayari, E. Cobas, O. Ogundadegbe, and M. S. Fuhrer, *J. Appl. Phys.* **101**, 014507 (2007).
- [186] H. S. S. R. Matte, A. Gomathi, A. K. Manna, D. J. Late, R. Datta, S. K. Pati, and C. N. R. Rao, *Angew. Chem.* **122**, 4153 (2010).
- [187] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, and A. Kis, *Nat. Nanotechnol.* **6**, 147 (2011).
- [188] C. Lee, H. Yan, L. E. Brus, T. F. Heinz, J. Hone, and S. Ryu, *ACS Nano* **4**, 2695 (2010).
- [189] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 136805 (2010).
- [190] G. Eda, H. Yamaguchi, D. Voiry, T. Fujita, M. Chen, and M. Chhowalla, *Nano Lett.* **11**, 5111 (2011).
- [191] Z. Y. Zhu, Y. C. Cheng, and U. Schwingenschlögl, *Phys. Rev. B* **84**, 153402 (2011).
- [192] T. Korn, S. Heydrich, M. Hirmer, J. Schmutzler, and C. Schüller, *Appl. Phys. Lett.* **99**,

- 102109 (2011).
- [193] J. K. Ellis, M. J. Lucero, and G. E. Scuseria, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 261908 (2011).
- [194] K. Behnia, *Nat. Nanotechnol.* **7**, 488 (2012).
- [195] Q. H. Wang, K. K. Zadeh, A. Kis, J. N. Coleman, and M. S. Strano, *Nat. Nanotechnol.* **7**, 699 (2012).
- [196] S. Kim, A. Konar, W.-S. Hwang, J. H. Lee, J. Lee, J. Yang, C. Jung, H. Kim, J.-B. Yoo, J.-Y. Choi, Y. W. Jin, S. Y. Lee, D. Jena, W. Choi, and K. Kim, *Nature Commun.* **3**, 1011 (2012).
- [197] D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng, X. Xu, and W. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 196802 (2012).
- [198] W. S. Yun, S. W. Han, S. C. Hong, I. G. Kim, and J. D. Lee, *Phys. Rev. B* **85**, 033305 (2012).
- [199] K. Kaasbjerg, K. S. Thygesen, and K. W. Jacobsen, *Phys. Rev. B* **85**, 115317 (2012).
- [200] T. Cheiwchanchamnangij and W. R. L. Lambrecht, *Phys. Rev. B* **85**, 205302 (2012).
- [201] B. D. Kong, C. Zeng, D. K. Gaskill, K. L. Wang, and K. W. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 263112 (2012).
- [202] D. Lembke and A. Kis, *ACS Nano* **6**, 10070 (2012).
- [203] H. Liu and P. D. Ye, *IEEE Electron Dev. Lett.* **33**, 546 (2012).
- [204] M. Buscema, M. Barkelid, V. Zwiller, H. S. van der Zant, G. A. Steele, and A. C. Gomez, *Nano Lett.* **13**, 358 (2013).
- [205] H.-Z. Lu, W. Yao, D. Xiao, and S.-Q. Shen, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 016806 (2013).
- [206] K. Kořmider and J. F. Rossier, *Phys. Rev. B* **87**, 075451 (2013).
- [207] H. Shi, H. Pan, Y.-W. Zhang, and B. I. Yakobson, *Phys. Rev. B* **87**, 155304 (2013).
- [208] K. Kaasbjerg, K. S. Thygesen, and A.-P. Jauho, *Phys. Rev. B* **87**, 235312 (2013).
- [209] H. Ochoa and R. Roldán, *Phys. Rev. B* **87**, 245421 (2013).
- [210] X. Li, J. T. Mullen, Z. Jin, K. M. Borysenko, M. B. Nardelli, and K. W. Kim, *Phys. Rev. B* **87**, 115418 (2013).
- [211] Y. Song and H. Dery, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 026601 (2013).
- [212] H. Rostami, A. G. Moghaddam, and R. Asgari, *Phys. Rev. B* **88**, 085440 (2013).
- [213] F. Zahid, L. Liu, Y. Zhu, J. Wang, and H. Guo, *AIP Adv.* **3**, 052111 (2013).
- [214] A. Kormányos, V. Zólyomi, N. D. Drummond, P. Rakyta, G. Burkard, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **88**, 045416 (2013).
- [215] J. Klinovaja and D. Loss, *Phys. Rev. B* **88**, 075404 (2013).
- [216] E. Cappelluti, R. Roldán, J. A. S. Guillén, P. Ordejón, and F. Guinea, *Phys. Rev. B* **88**, 075409 (2013).
- [217] Z. G. Yu and M. E. Flatté, *Phys. Rev. B* **66**, 201202(R) (2002).
- [218] T. Yu and M. W. Wu, *Phys. Rev. A* **92**, 013607 (2015).
- [219] D. Stich, J. Zhou, T. Korn, R. Schulz, D. Schuh, W. Wegscheider, M. W. Wu, and C. Schuller, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 176401 (2007).
- [220] E. H. Hwang and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **75**, 205418 (2007).
- [221] B. Wunsch, T. Stauber, F. Sols, and F. Guinea, *New J. Phys.* **8**, 318 (2006).

-
-
- [222] X.-F. Wang and T. Chakraborty, Phys. Rev. B **75**, 033408 (2007).
- [223] K. Shen and M. W. Wu, Phys. Rev. B **82**, 115205 (2010).
- [224] N. S. Averkiev and L. E. Golub, Phys. Rev. B **60**, 15582 (1999).
- [225] J. Schliemann and D. Loss, Phys. Rev. B **68**, 165311 (2003).
- [226] R. Winkler, Phys. Rev. B **69**, 045317 (2004).
- [227] S. I. Erlingsson, J. Schliemann, and D. Loss, Phys. Rev. B **71**, 035319 (2005).
- [228] N. S. Averkiev, L. E. Golub, A. S. Gurevich, V. P. Evtikhiev, V. P. Kochereshko, A. V. Platonov, A. S. Shkolnik, and Y. P. Efimov, Phys. Rev. B **74**, 033305 (2006).
- [229] J. L. Cheng and M. W. Wu, J. Appl. Phys. **99**, 083704 (2006).
- [230] M. Ohno and K. Yoh, Phys. Rev. B **75**, 241308(R) (2007).
- [231] B. Liu, H. Zhao, J. Wang, L. Liu, W. Wang, D. Chen, and H. Zhu, Appl. Phys. Lett. **90**, 112111 (2007).
- [232] 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).
- [233] J. D. Koralek, C. P. Weber, J. Orenstein, B. A. Bernevig, S. C. Zhang, S. Mack, and D. D. Awschalom, Nature **458**, 610 (2009).
- [234] Y. Ohno, R. Terauchi, T. Adachi, F. Matsukura, and H. Ohno, Phys. Rev. Lett. **83**, 4196 (1999).
- [235] K. C. Hall, K. Gündoğdu, E. Altunkaya, W. H. Lau, M. E. Flatté, T. F. Boggess, J. J. Zinck, W. B. Barvosa-Carter, and S. L. Skeith, Phys. Rev. B **68**, 115311 (2003).
- [236] S. Döhrmann, Hägele, J. Rudolph, M. Bichler, D. Schuh, and M. Oestreich, Phys. Rev. Lett. **93**, 147405 (2004).
- [237] X. Cartoixa, D. Z.-Y. Ting, and Y.-C. Chang, Phys. Rev. B **71**, 045313 (2005).
- [238] A. Balocchi, Q. H. Duong, P. Renucci, B. L. Liu, C. Fontaine, T. Amand, D. Lagarde, and X. Marie, Phys. Rev. Lett. **107**, 136604 (2011).
- [239] G. Wang, A. Balocchi, D. Lagarde, C. R. Zhu, T. Amand, P. Renucci, Z. W. Shi, W. X. Wang, B. L. Liu, and X. Marie, Appl. Phys. Lett. **102**, 242408 (2013).
- [240] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- [241] G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Wiley, New York, 1974).
- [242] P. O. Löwdin, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951).
- [243] P. Langot, R. Tommasi, and F. Vallée, Phys. Rev. B **54**, 1775 (1996).
- [244] P. Schneider, J. Kainz, S. D. Ganichev, S. N. Danilov, U. Rössler, W. Wegscheider, D. Weiss, and W. Prettl, J. Appl. Phys. **96**, 420 (2004).
- [245] C. Lü, J. L. Cheng, and M. W. Wu, Phys. Rev. B **73**, 125314 (2006).
- [246] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum, New York, 1990).
- [247] K. M. Borysenko, J. T. Mullen, X. Li, Y. G. Semenov, J. M. Zavada, M. B. Nardelli, and K. W. Kim, Phys. Rev. B **83**, 161402(R) (2011).
- [248] S. Piscanec, M. Lazzeri, F. Mauri, A. C. Ferrari, and J. Robertson, Phys. Rev. Lett. **93**, 185503 (2004).

-
-
- [249] M. Lazzeri, S. Piscanec, F. Mauri, A. C. Ferrari, and J. Robertson, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 236802 (2005).
- [250] F. Rana, P. A. George, J. H. Strait, J. Dawlaty, S. Shivaraman, M. Chandrashekar, and M. G. Spencer, *Phys. Rev. B* **79**, 115447 (2009).
- [251] J. K. Viljas and T. T. Heikkilä, *Phys. Rev. B* **81**, 245404 (2010).
- [252] S. D. Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 407 (2011).
- [253] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, *Phys. Rev. B* **29**, 1685 (1984).
- [254] E. Cappelluti and G. Profeta, *Phys. Rev. B* **85**, 205436 (2012).
- [255] S. D. Sarma, E. H. Hwang, and E. Rossi, *Phys. Rev. B* **81**, 161407(R) (2010).
- [256] S. Adam and M. D. Stiles, *Phys. Rev. B* **82**, 075423 (2010).
- [257] J. Stephens, J. Berezovsky, J. P. McGuire, L. J. Sham, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 097602 (2004).
- [258] A. Kormányos, V. Zólyomi, N. D. Drummond, and G. Burkard, *Phys. Rev. X* **4**, 011034 (2014).
- [259] L. F. Han, Y. G. Zhu, X. H. Zhang, P. H. Tan, H. Q. Ni, and Z. C. Niu, *Nanoscale Res. Lett.* **6**, 84 (2011).
- [260] M. Krauß, H. C. Schneider, R. Bratschitsch, Z. Chen, and S. T. Cundiff, *Phys. Rev. B* **81**, 035213 (2010).
- [261] M. W. Wu and M. Kuwata-Gonokami, *Solid State Commun.* **121**, 509 (2002).
- [262] G. B. Liu, W. Y. Shan, Y. Yao, W. Yao, and D. Xiao, *Phys. Rev. B* **88**, 085433 (2013).
- [263] A. Kormányos, G. Burkard, M. Gmitra, J. Fabian, V. Zólyomi, N. D. Drummond, and V. Fal'ko, *2D Mater.* **2**, 049501 (2015).
- [264] X. X. Zhang, Y. You, S. Y. F. Zhao, and T. F. Heinz, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 257403 (2015).
- [265] H. Ochoa, F. Guinea, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **88**, 195417 (2013).
- [266] B. Bishnoi and B. Ghosh, *J. Comput. Electron.* **13**, 394 (2014).
- [267] J. L. Cheng and M. W. Wu, *J. Appl. Phys.* **101**, 073702 (2007).
- [268] M. Q. Weng and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **66**, 235109 (2002).
- [269] M. Q. Weng and M. W. Wu, *J. Appl. Phys.* **93**, 410 (2003).
- [270] J. L. Cheng, M. W. Wu, and I. C. da Cunha Lima, *Phys. Rev. B* **75**, 205328 (2007).
- [271] P. Zhang and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **84**, 014433 (2011).
- [272] P. Zhang and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **79**, 075303 (2009).
- [273] L. Wang and M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **89**, 205401 (2014).
- [274] B. Y. Sun and K. Shen, *Solid State Commun.* **151**, 1322 (2011).
- [275] E. Majorana, *Nuovo Cimento* **14**, 171 (1937).
- [276] A. Y. Kitaev, *Phys. Usp.* **44**, 131 (2001).
- [277] J. Alicea, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 076501 (2012).
- [278] C. W. Beenakker, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **4**, 113 (2013).
- [279] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
- [280] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- [281] M. Leijnse and K. Flensberg, *Semicond. Sci. Technol.* **27**, 124003 (2012).

-
-
- [282] N. Read and D. Green, Phys. Rev. B **61**, 10267 (2000).
- [283] G. E. Volovik, JETP Lett. **70**, 609 (1999).
- [284] D. A. Ivanov, Phys. Rev. Lett. **86**, 268 (2001).
- [285] A. P. Mackenzie and Y. Maeno, Rev. Mod. Phys. **75**, 657 (2003).
- [286] Z.-Z. Li, F.-C. Zhang, and Q.-H. Wang, Sci. Rep. **4**, 6363 (2014).
- [287] J. D. Sau, R. M. Lutchyn, S. Tewari, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **104**, 040502 (2010).
- [288] L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. Lett. **100**, 096407 (2008).
- [289] J. D. Sau, S. Tewari, R. M. Lutchyn, T. D. Stanescu, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **82**, 214509 (2010).
- [290] J. Alicea, Phys. Rev. B **81**, 125318 (2010).
- [291] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **105**, 077001 (2010).
- [292] J. Alicea, Y. Oreg, G. Refael, F. von Oppen, and M. P. A. Fisher, Nat. Phys. **7**, 412 (2011).
- [293] B. I. Halperin, Y. Oreg, A. Stern, G. Refael, J. Alicea, and F. von Oppen, Phys. Rev. B **85**, 144501 (2012).
- [294] T. D. Stanescu and S. Tewari, J. Phys.: Condens. Matter **25**, 233201 (2013).
- [295] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, Science **336**, 1003 (2012).
- [296] Y. Zhou and M. W. Wu, J. Phys.: Condens. Matter **26**, 065801 (2014).
- [297] B. Y. Sun and M. W. Wu, New J. Phys. **16**, 073045 (2014).
- [298] J. J. He, J. Wu, T.-P. Choy, X.-J. Liu, Y. Tanaka, and K. T. Law, Nature Commun. **5**, 3232 (2014).
- [299] S. Tewari and J. D. Sau, Phys. Rev. Lett. **109**, 150408 (2012).
- [300] S. Tewari, T. D. Stanescu, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **86**, 024504 (2012).
- [301] M. Diez, J. P. Dahlhaus, M. Wimmer, and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **86**, 094501 (2012).
- [302] C. L. M. Wong, J. Liu, K. T. Law, and P. A. Lee, Phys. Rev. B **88**, 060504(R) (2013).
- [303] A. Haim, A. Keselman, E. Berg, and Y. Oreg, Phys. Rev. B **89**, 220504(R) (2014).
- [304] C. Dutreix, M. Guigou, D. Chevallier, and C. Bena, Eur. Phys. J. B **87**, 296 (2014).
- [305] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, J. Li, H. Chen, S. Jeon, J. Seo, A. H. MacDonald, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, Science **346**, 602 (2014).
- [306] J. Li, H. Chen, I. K. Drozdov, A. Yazdani, B. A. Bernevig, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **90**, 235433 (2014).
- [307] H.-Y. Hui, P. M. R. Brydon, J. D. Sau, S. Tewari, and S. Das Sarma, Sci. Rep. **5**, 8880 (2015).
- [308] E. Dumitrescu, B. Roberts, S. Tewari, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **91**, 094504 (2015).
- [309] K. Pöyhönen, A. Westström, and T. Ojanen, Phys. Rev. B **93**, 014517 (2016).
- [310] J. Röntynen and T. Ojanen, Phys. Rev. Lett. **114**, 236803 (2015).
- [311] J. Li, T. Neupert, Z. J. Wang, A. H. MacDonald, A. Yazdani, and B. Andrei Bernevig,

- arXiv:1501.00999.
- [312] X.-L. Qi, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **82**, 184516 (2010).
- [313] J. Wang, Q. Zhou, B. Lian, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **92**, 064520 (2015).
- [314] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, Phys. Rev. B **78**, 195125 (2008).
- [315] A. Kitaev, AIP Conf. Proc. **1134**, 22 (2009).
- [316] C. W. J. Beenakker, Rev. Mod. Phys. **87**, 1037 (2015).
- [317] A. Kitaev, Annals of Physics **321**, 2 (2006).
- [318] X. G. Wen and A. Zee, Nuclear Physics B **316**, 641 (1989).
- [319] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (W. A. Benjamin, New York, 1966).
- [320] T. D. Stanescu, R. M. Lutchyn, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **84**, 144522 (2011).
- [321] J. Liu, A. C. Potter, K. T. Law, and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **109**, 267002 (2012).
- [322] E. J. H. Lee, X. Jiang, R. Aguado, G. Katsaros, C. M. Lieber, and S. De Franceschi, Phys. Rev. Lett. **109**, 186802 (2012).
- [323] H. O. H. Churchill, V. Fatemi, K. Grove-Rasmussen, M. T. Deng, P. Caroff, H. Q. Xu, and C. M. Marcus, Phys. Rev. B **87**, 241401(R) (2013).
- [324] D. I. Pikulin, J. P. Dahlhaus, M. Wimmer, H. Schomerus, and C. W. Beenakker, New J. Phys. **14**, 125011 (2012).
- [325] G. Kells, D. Median, and P. W. Brouwer, Phys. Rev. B **86**, 100503(R) (2012).
- [326] A. Keselman, L. Fu, A. Stern, and E. Berg, Phys. Rev. Lett. **111**, 116402 (2013).
- [327] H. Ebisu, B. Lu, J. Klinovaja, and Y. Tanaka, arXiv:1511.05754.
- [328] L. Wang and M. W. Wu, Phys. Rev. B **93**, 054502 (2016).
- [329] X. L. Qi, Y. S. Wu, and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **74**, 085308 (2006).
- [330] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
- [331] Z. H. Qiao, S. A. Yang, W. Feng, W.-K. Tse, J. Ding, Y. Yao, J. Wang, and Q. Niu, Phys. Rev. B **82**, 161414(R) (2010).
- [332] C. Niu, P. M. Buhl, G. Bihlmayer, D. Wortmann, S. Blugel, and Y. Mokrousov, Phys. Rev. B **91**, 201401(R) (2015).
- [333] Z. H. Qiao, W. Ren, H. Chen, L. Bellaiche, Z. Y. Zhang, A. H. MacDonald, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **112**, 116404 (2014).
- [334] G. Xu, B. Lian, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **115**, 186802 (2015).
- [335] M. Ezawa, Y. Tanaka, and N. Nagaosa, Sci. Rep. **3**, 2790 (2013).
- [336] V. N. Golovach, A. Khaetskii, and D. Loss, Phys. Rev. B **77**, 045328 (2008).
- [337] J. M. Taylor, J. R. Petta, A. C. Johnson, A. Yacoby, C. M. Marcus, and M. D. Lukin, Phys. Rev. B **76**, 035315 (2007).
- [338] D. Paget, G. Lampel, B. Sapoval, and V. I. Safarov., Phys. Rev. B **15**, 5780 (1977).
- [339] S. I. Erlingsson, Y. V. Nazarov, and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B **64**, 195306 (2001).
- [340] A. Khaetskii, D. Loss, and L. Glazman, Phys. Rev. B **67**, 195329 (2003).

-
-
- [341] W. M. Witzel and S. D. Sarma, Phys. Rev. B **74**, 035322 (2006).
- [342] W. Yao, R.-B. Liu, and L. J. Sham, Phys. Rev. B **74**, 195301 (2006).
- [343] W. Zhang, V. V. Dobrovitski, K. A. Al-Hassanieh, E. Dagotto, and B. N. Harmon, Phys. Rev. B **74**, 205313 (2006).
- [344] C. Deng and X. Hu, Phys. Rev. B **78**, 245301 (2008).
- [345] W. A. Coish, J. Fischer, and D. Loss, Phys. Rev. B **77**, 125329 (2008).
- [346] L. Cywiński, W. M. Witzel, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **102**, 057601 (2009).
- [347] L. Cywiński, W. M. Witzel, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **79**, 245314 (2009).
- [348] W. Pan, X. Z. Yu, and W. Z. Shen, Appl. Phys. Lett. **95**, 013103 (2009).
- [349] H. W. Liu, T. Fujisawa, Y. Ono, H. Inokawa, A. Fujiwara, K. Takashina, and Y. Hirayama, Phys. Rev. B **77**, 073310 (2008).
- [350] W. A. Coish and D. Loss, Phys. Rev. B **70**, 195340 (2004).
- [351] J. M. Taylor, W. Dür, P. Zoller, A. Yacoby, C. M. Marcus, and M. D. Lukin, Phys. Rev. Lett. **94**, 236803 (2005).
- [352] L. Vervoort, R. Ferreira, and P. Voisin, Phys. Rev. B **56**, 12744(R) (1997).
- [353] L. Vervoort, R. Ferreira, and P. Voisin, Semicond. Sci. Technol. **14**, 227 (1999).
- [354] M. O. Nestoklon, E. L. Ivchenko, J.-M. Jancu, and P. Voisin, Phys. Rev. B **77**, 155328 (2008).
- [355] T. B. Boykin, G. Klimeck, M. A. Eriksson, M. Friesen, S. N. Coppersmith, P. von Allmen, F. Oyafuso, and S. Lee, Appl. Phys. Lett. **84**, 115 (2004).
- [356] M. Friesen, S. Chutia, C. Tahan, and S. N. Coppersmith, Phys. Rev. B **75**, 115318 (2007).
- [357] M. A. Eriksson, M. Friesen, S. N. Coppersmith, R. Joynt, L. J. Klein, K. A. Slinker, C. Tahan, P. M. Mooney, J. O. Chu, and S. J. Koester, Quant. Inf. Proc. **3**, 133 (2004).
- [358] D. Culcer, A. L. Saraiva, B. Koiller, X. Hu, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **108**, 126804 (2012).
- [359] V. Fock, Z. Phys. **47**, 446 (1928).
- [360] C. G. Darwin, Proc. Cambridge Philos. Soc. **27**, 86 (1931).
- [361] A. L. Saraiva, M. J. Calderón, X. Hu, S. Das Sarma, and B. Koiller, Phys. Rev. B **80**, 081305(R) (2009).
- [362] S. Chutia, S. N. Coppersmith, and M. Friesen, Phys. Rev. B **77**, 193311 (2008).
- [363] R. N. Dexter, B. Lax, A. F. Kip, and G. Dresselhaus, Phys. Rev. **96**, 222 (1954).
- [364] C. F. O. Graeff, M. S. Brandt, M. Stutzmann, M. Holzmann, G. Abstreiter, and F. Schäffler, Phys. Rev. B **59**, 13242 (1999).
- [365] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices* (Wiley-Interscience, New York, 1981), p. 849.
- [366] E. Sonder and D. K. Stevens, Phys. Rev. **110**, 1027 (1958).
- [367] E. Pop, R. W. Dutton, and K. E. Goodson, J. Appl. Phys. **96**, 4998 (2004).
- [368] E. I. Rashba and E. Y. Sherman, Phys. Lett. A **129**, 175 (1988).
- [369] G. A. Baker Jr., *Essentials of Padé Approximants* (Academic, New York, 1975).
- [370] L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006).

本硕博期间发表的论文

1. **L. Wang**, K. Shen, S. Y. Cho, and M. W. Wu, “A scheme for spin transistor with extremely large on/off current ratio”, *J. Appl. Phys.* **104**, 123709 (2008). (本科毕业论文, 未包含在本论文中)
2. **L. Wang**, K. Shen, B. Y. Sun, and M. W. Wu, “Singlet-triplet relaxation in multivalley silicon single quantum dots”, *Phys. Rev. B* **81**, 235326 (2010). (包含在第 9 章中)
3. **L. Wang** and M. W. Wu, “Singlet-triplet relaxation in SiGe/Si/SiGe double quantum dots”, *J. Appl. Phys.* **110**, 043716 (2011). (包含在第 9 章中)
4. **L. Wang** and M. W. Wu, “Hole spin relaxation in p-type (111) GaAs quantum wells”, *Phys. Rev. B* **85**, 235308 (2012). (对应第 3 章)
5. **L. Wang** and M. W. Wu, “Electron spin relaxation in bilayer graphene”, *Phys. Rev. B* **87**, 205416 (2013). (对应第 4 章)
6. Y. F. Ren, **L. Wang** (Corresponding author), Z. Liu, and M. W. Wu, “Energy spectra of three electrons in Si/SiGe laterally coupled triple quantum dots”, *Physica E* **63**, 329 (2014). (未包含在本论文中)
7. **L. Wang** and M. W. Wu, “Intrinsic electron spin relaxation due to the D'yakonov-Perel' mechanism in monolayer MoS₂”, *Phys. Lett. A* **378**, 1336 (2014). (包含在第 5 章中)
8. **L. Wang** and M. W. Wu, “Electron spin relaxation due to D'yakonov-Perel' and Elliot-Yafet mechanisms in monolayer MoS₂: Role of intravalley and intervalley processes”, *Phys. Rev. B* **89**, 115302 (2014). (包含在第 5 章中)
9. **L. Wang** and M. W. Wu, “Electron spin diffusion in monolayer MoS₂”, *Phys. Rev. B* **89**, 205401 (2014). (对应第 6 章)
10. **L. Wang** and M. W. Wu, “Topological superconductor with a large Chern number and a large bulk excitation gap in single-layer graphene”, *Phys. Rev. B* **93**, 054502 (2016). (对应第 8 章)
11. Z. Liu, **L. Wang**, and K. Shen, “Energy spectra of three electrons in Si/SiGe single and double quantum dots”, *Phys. Rev. B* **85**, 045311 (2012). (未包含在本论文中)

-
-
12. J. G. Xu, **L. Wang**, and M. Q. Weng, “*Quasi-bound states and Fano effect in T-shaped graphene nanoribbons*”, *J. Appl. Phys.* **114**, 153701 (2013). (未包含在本论文中)
 13. F. Yang, **L. Wang**, and M. W. Wu, “*Hole spin relaxation in bilayer WSe₂*”, *Phys. Rev. B* **92**, 155414 (2015). (未包含在本论文中)

会议报告

1. Oral representation at the 13th National Conference on Magnetism, Yichang, **CHINA**, October 31-November 5, 2008. Title: “*A scheme for spin transistor with large on/off current ratio*”. Contributing authors: **L. Wang**, K. Shen, S. Y. Cho, and M. W. Wu.
2. Posters at the 17th National Conference on Condensed Matter Theory and Statistical Physics, Lanzhou, **CHINA**, July 23-26, 2012. Title: “*Singlet-triplet relaxation in silicon single and double quantum dots*”. Contributing authors: **L. Wang**, K. Shen, and M. W. Wu; Title: “*Hole spin relaxation in p-type (111) GaAs quantum wells*”. Contributing authors: **L. Wang** and M. W. Wu.
3. Poster at the 20th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (EP2DS 2013), Wroclaw, **POLAND**, July 1-5, 2013. Title: “*Electron spin relaxation in bilayer graphene and monolayer MoS₂*”. Contributing authors: **L. Wang** and M. W. Wu.
4. Oral representation at the 15th National Conference on Magnetism, Guilin, **CHINA**, November 16-19, 2013. Title: “*A novel D’yakonov-Perel’ spin relaxation due to intervalley scattering in rippled single-layer graphene, flat bilayer graphene and monolayer MoS₂*”. Contributing authors: **L. Wang** and M. W. Wu.
5. Oral representation at Graphene 2014 event, Toulouse, **FRANCE**, May 6-9, 2014. Title: “*Electron spin relaxation in bilayer graphene and monolayer MoS₂*”. Contributing authors: **L. Wang** and M. W. Wu.

致 谢

首先，我要由衷感谢我的导师吴明卫教授这么多年以来对我的悉心指导和栽培。吴老师对我的影响是全方面的。在科研上，吴老师教导我不仅要打下坚实的数理基础，学会独立地思考物理问题，建立简单清晰的物理图像，还要有严谨踏实的态度和起码的专业精神。虽然这些年自己在科研上取得了一些成绩，各个方面的能力都有所提高，但是与一名优秀的科研工作者之间还有非常大的差距，只有接下来不断地提高自我要求，才能在科研的道路上走得更远。在生活上，吴老师也教会了我许多为人处事的道理，其中印象最为深刻的有两个，一个是做人要有感恩之心，另一个是要生活在真实中间。另外，吴老师还在人文方面给了我很多熏陶和教育，从阅读人文书籍到思考社会现实问题等等，很惭愧的是自己在这方面还很欠缺。同时，我还要感谢吴老师的夫人孙炜老师和吴老师的母亲陈宝珠老师这么多年以来对我的关心和帮助。

我要感谢沈卡师兄在我低年级的时候对我全面的指导和帮助，他认真的学习态度和严谨的科研作风给我留下了极其深刻的印象。我还要特别感谢于涛师弟在我高年级的时候对我的帮助，他让我意识到自己在科研上还有很多不足，之后我才有了更大的进步，另外，在跟他讨论学术问题的时候，他发散性的思维总能让我有不少收获。感谢翁明其副教授、沈卡、孙伯业以及杨飞在我们合作的工作中的重要贡献。此外，我还要感谢程晋罗、蒋建华、周俊、张鹏、周扬以及殷曰博士，跟他们的讨论极大地丰富了我的知识面。

感谢教过我的老师们，他们的谆谆教诲让我受益匪浅。感谢我的同学和朋友们，跟他们的讨论和交流总能让我学到很多东西，与他们共度的时光将是我人生中一段非常美好的回忆。

最后，特别要感谢我的父母一直以来对我的支持和鼓励。感谢我的朋友于晶晶对我的关心和支持。

王琳

二零一六年七月