

## 量子点双链中电子自旋极化输运性质\*

安兴涛<sup>1)2)†</sup> 穆惠英<sup>3)</sup> 咸立芬<sup>1)</sup> 刘建军<sup>4)</sup>

1) (河北科技大学理学院, 石家庄 050018)

2) (中国科学院半导体研究所, 北京 100083)

3) (河北化工医药职业技术学院化工系, 石家庄 050026)

4) (石家庄学院物理系, 石家庄 050035)

(2011年12月19日收到; 2012年1月9日收到修改稿)

利用非平衡格林函数方法, 研究了与单个量子点耦合的量子点双链中电子自旋极化输运性质. 由于系统中 Rashba 自旋轨道耦合产生的自旋相关的相位, 电子通过上下两种路径时, 自旋不同的电子干涉情况不同, 从而导致了电极中的自旋极化流. 左右两电极间的偏压使单个量子点中的自旋积聚在很大能量区域内能够保持较大的值. 由于系统结构的左右不对称, 正负偏压下自旋积聚情况完全不同. 这些计算结果将有助于实验上设计新型的自旋电子学器件.

**关键词:** 自旋极化输运, 量子点链, 非平衡格林函数

**PACS:** 72.25.Dc, 73.23.-b, 85.35.Ds

## 1 引言

由于电子的自旋在纳米器件中的潜在应用价值, 自旋电子学已经成为凝聚态物理学和材料科学领域内最引人瞩目的研究前沿之一. 自旋电子学的主要任务和目标就是如何在介观系统中实现电子自旋的极化与探测. 在各种介观系统中, 量子点中自旋极化输运性质越来越受到人们的关注. 量子点中的电子自旋被认为是作为量子比特实现未来量子计算和通讯的理想候选之一. 这首先需要实现量子点中的自旋极化并能够对自旋进行控制和操纵. 最直接的方法就是将量子点耦合到铁磁电极上或者在量子点上加磁场来控制 and 操纵自旋, 但是这两种方法在实际的实验中很难实现. 最近, 许多理论和实验物理学家致力于利用自旋轨道耦合实现半导体量子点中自旋的极化和操控 [1-6].

近年来, 由于量子器件的纳米制备技术的发展, 实验上已经能够制备长程有序的量子点链结构 [7]. 量子点链在新型光电器件和量子信息中具有潜在应用价值, 因此多量子点结构中电子输运性质引起了人们的极大研究兴趣 [8-13]. Ojeda 等人报道了基于 Dicke 和 Fano 效应的量子点链自旋过滤器 [14]. 一臂中嵌有量子点链的 Aharonov-Bohm 环的自旋极化随量子点个数奇偶振荡性质以及将具有旁耦合量子点链的 Aharonov-Bohm 环作为自旋开关器件的研究也被报道 [15, 16]. 关于量子点双链中的自旋极化输运性质的相关研究内容还比较少. 由于通过不同量子点链的电子会发生相互干涉, 最终会导致更丰富的自旋极化输运性质. 本文提出与单个量子点耦合的量子点双链系统作为自旋过滤器和自旋二极管的设想. 该研究有助于理解多量子点系统中的自旋极化输运性质并为新型自旋电子学器件的设计和应用提供物理模型和理论基础.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11047184, 11104059, 61176089) 和河北省自然科学基金 (批准号: A2011208010) 资助的课题.

† E-mail: anxt2005@163.com

## 2 模型和方法

我们研究的物理模型是由耦合到左右两个电极上的  $2N + 1$  个量子点组成, 如图 1 所示. 上下量子点链都是由  $N$  个量子点组成, 两量子点链中间包含磁通, 每个量子点中只包含一个能级并且考虑其中的 Rashba 自旋轨道耦合. 体系的哈密顿可以表示为

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{k,\sigma,\alpha=L,R} \varepsilon_{k\alpha} a_{k\alpha\sigma}^\dagger a_{k\alpha\sigma} \\
 & + \sum_{\sigma,i=1}^N (E_u u_{i\sigma}^\dagger u_{i\sigma} + E_d d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}) + E_c c_\sigma^\dagger c_\sigma \\
 & + \left[ \sum_{\sigma,i=1}^{N-1} (t_u u_{i\sigma}^\dagger u_{(i+1)\sigma} + t_d d_{i\sigma}^\dagger d_{(i+1)\sigma}) \right. \\
 & \left. + t_{uc} u_{N\sigma}^\dagger c_\sigma + t_{dc} d_{N\sigma}^\dagger c_\sigma \right] + \text{H.c.} \\
 & + \sum_{k\sigma} (\tilde{t}_{Lu} a_{kL\sigma}^\dagger u_{1\sigma} + t_{Ld} a_{kL\sigma}^\dagger d_{1\sigma} \\
 & + t_{Rc} a_{kR\sigma}^\dagger c_\sigma) + \text{H.c.}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

其中,  $\sigma = \pm 1(\uparrow, \downarrow)$  分别代表自旋向上和向下;  $a_{k\alpha\sigma}^\dagger$ ,  $u_{i\sigma}^\dagger$ ,  $d_{i\sigma}^\dagger$  和  $c_\sigma^\dagger$  ( $a_{k\alpha\sigma}$ ,  $u_{i\sigma}$ ,  $d_{i\sigma}$  和  $c_\sigma$ ) 分别是电极  $\alpha$ 、上量子点链、下量子点链和量子点  $c$  中电子产生(湮没)算符.  $\varepsilon_{k\alpha}$ ,  $E_u$ ,  $E_d$  和  $E_c$  分别是电极  $\alpha$ 、上量子点链、下量子点链和量子点  $c$  中电子的能量.  $t_u$ ,  $t_d$ ,  $t_{uc}$ ,  $t_{dc}$ ,  $\tilde{t}_{Lu}$ ,  $t_{Ld}$  和  $t_{Rc}$  分别是上量子点链相邻量子点间、下量子点链相邻量子点间、上量子点链与量子点  $c$  间、下量子点链与量子点  $c$  间、左电极与上量子点链间、左电极与下量子点链间、右电极与量子点  $c$  间的耦合系数.  $\tilde{t}_{Lu} = t_{Lu} e^{-i\sigma\varphi_R + i\phi}$ , 其中  $-\sigma\varphi_R$  和  $\phi$  分别是 Rashba 自旋轨道耦合和磁通引起的相位<sup>[1]</sup>.

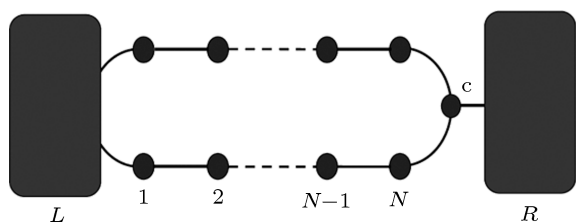


图 1 与单个量子点耦合的量子点双链结构示意图

我们利用非平衡格林函数方法计算系统中的自旋极化输运性质. 推迟的格林函数可以定义

为  $(2N + 3) \times (2N + 3)$  矩阵<sup>[15]</sup>. 推迟的格林函数可以利用 Dyson 方程得到

$$G_\sigma^r = g_\sigma^r + g_\sigma^r \Sigma_\sigma^r G_\sigma^r, \quad (2)$$

其中,  $g_\sigma^r$  是电极和量子点中自由的格林函数,  $\Sigma_\sigma^r$  是推迟的自能. 得到推迟格林函数后利用 Keldysh 方程可以直接得到小于格林函数

$$G_\sigma^<(\omega) = G_\sigma^r(\omega) \Sigma_\sigma^< G_\sigma^a(\omega), \quad (3)$$

其中, 小于自能  $\Sigma_\sigma^<$  是对角矩阵, 而且  $\Sigma_{\alpha\alpha\sigma}^< = 2i\pi f_\alpha(\omega)/\pi\rho$ ,  $\Sigma_{ii\sigma}^< = 0$ .  $f_\alpha(\omega) = 1/[e^{(\omega-\mu_\alpha)/k_B T} + 1]$  是电极  $\alpha$  中费米分布函数,  $\rho$  是电极中的态密度,  $\mu_L = -\mu_R = V/2$  是电极中的化学势,  $V$  是两电极间的偏压;  $G_\sigma^a = G_\sigma^{r\dagger}$  是超前格林函数. 左电极中自旋相关的电流可以表示为

$$I_\sigma = \frac{2e}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \text{Re}[\tilde{t}_{Lu} G_{uL}^<(\omega) + t_{Ld} G_{dL}^<(\omega)]. \quad (4)$$

自旋相关的电导、量子点的占有数和自旋积聚分别表示为  $G_\sigma = dI_\sigma/dV$ ,  $n_{i\sigma} = -i \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{ii\sigma}^<(\omega)$  和  $\Delta n_i = n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}$ .

## 3 结果与讨论

为简化计算, 本文中假设态密度  $\rho = 1$ , 温度  $k_B T = 0.0001$ , 所有耦合系数都为常数 0.4. 能量以  $\Gamma \equiv 2\pi\rho|t_{Rc}|^2 \approx 1$  为单位. 上、下量子点链中量子点能量分别为  $E_u = E_c + h$  和  $E_d = E_c - h$ , 其中  $h$  为量子点链中量子点与量子点  $c$  之间的能量差.

图 2 中给出了  $\varphi_R = \phi = 0$  时, 量子点链中具有不同量子点个数情况下, 总电导随量子点能级  $E_c$  的变化. 实线、虚线和点线分别代表  $h = 0$ ,  $h = 0.1$  和  $h = 0.2$ . 从图 2 中我们可以发现当  $h = 0$  时, 电导谱在  $-\Gamma < E_c < \Gamma$  区域内出现了  $N$  个共振峰, 说明  $2N + 1$  个量子点结构包含  $N$  个子能级, 当每个子能级与电极中化学势对应时便会出现一个共振峰. 随着量子点数目的增多共振峰数目也增多. 另外, 我们发现当每个量子点链中量子点数目  $N$  为奇数时, 在  $E_c = 0$  处电导是共振峰,  $N$  为偶数时电导不是共振峰, 这和单量子点链的电导奇偶共振性质是相同的. 当上下量子点链能级不相等时, 也就是  $h \neq 0$  时, 我们发现  $-\Gamma < E_c < \Gamma$  区域内出现了  $N$  个非常尖锐的

反共振,这很容易让我们想到光学中的 Dicke 效应,也就是当一对原子之间的距离小于对应的辐射波长时,光谱中会出现一个非常窄的发射谱线.我们研究的结构中能量差  $h$  相当于原子间的间距,由于上下量子点链不是直接耦合在一起因此电导谱中出现的是尖锐的反共振而不是共振峰,而且反共

振数目和每个量子点链中量子点数目相等.这种反共振的出现本质是由于电子通过上、下两量子点链两个路径产生干涉相消的结果.随着  $h$  的增大,相当于原子间距的增大,这种反共振现象逐渐减弱.

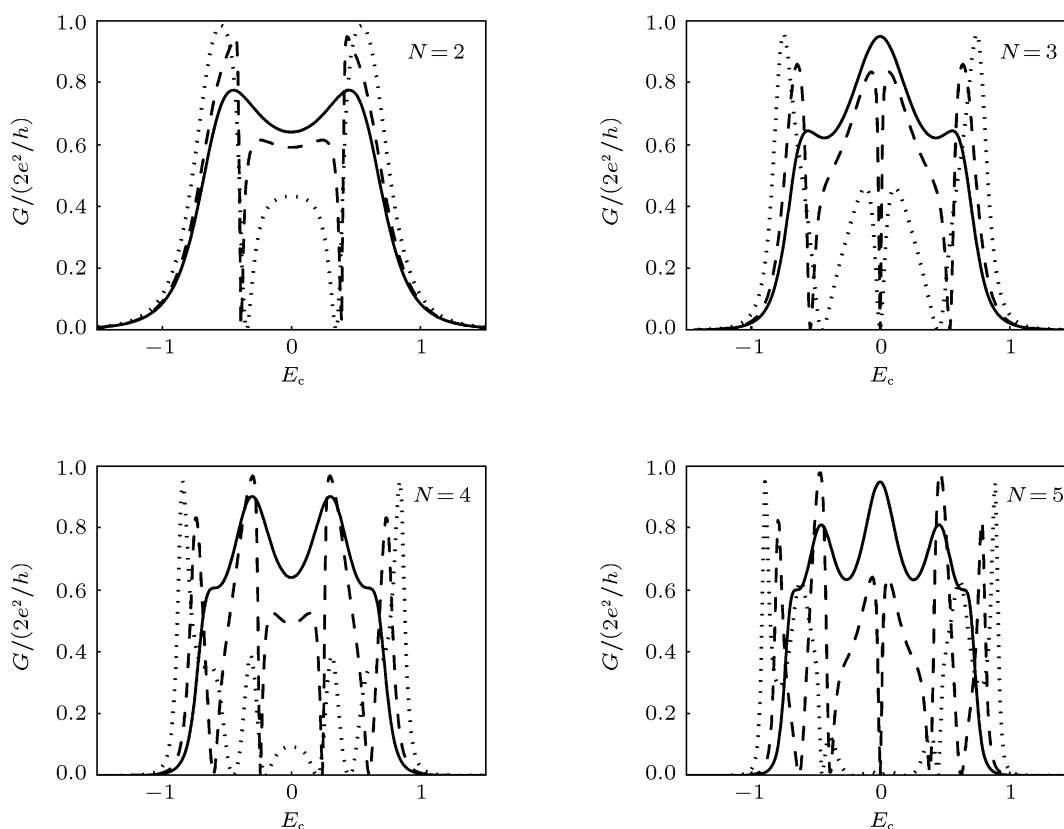


图2 总电导随量子点  $c$  能级的变化

图3给出了  $\varphi_R = \phi = \pi/2$  时,量子点链中不同量子点个数情况下,自旋相关的电导随量子点能级  $E_c$  的变化.实线和虚线分别代表  $h = 0$  和  $h = 0.1$ ,粗线和细线分别代表自旋向上和自旋向下的电导.由于  $\varphi_R = \phi = \pi/2$ ,对于自旋向上的电子  $\tilde{t}_{Lu} = t_{Lu}$ ,而对于自旋向下的电子  $\tilde{t}_{Lu} = t_{Lu} e^{i\pi}$ ,因此这种情况下磁通和 Rashba 自旋轨道耦合对自旋向上的电子没有任何影响,而自旋向下的电子通过上量子点链时附加了一个相位  $\pi$ ,这必将影响自旋向下电子通过上下量子点链两种路径达到量子点  $c$  的干涉情况.由于这种自旋向上和向下电子干涉情况的不同导致了如图3所

示自旋向上和向下电导的分离,最终将导致电极中自旋极化流的产生.特别是当  $h = 0$  时,自旋向下电子的干涉完全相消,也就是这种情况下只有自旋向上的电子通过器件,而自旋向下的电子完全不能通过器件.只要每个量子点能级在  $-\Gamma < E_c < \Gamma$  区域内在电极中就可以得到完全自旋极化的电流.当  $h = 0.1$  时,自旋向上和向下的电子都出现了非常强的反共振,但是与不考虑磁通和自旋轨道耦合情况下比较,自旋向下电子反共振对应的能量发生了变化,反共振个数变为  $N - 1$ .

另外,我们计算了量子点  $c$  中的自旋相关的占有数和其中的自旋积聚.下面的计算我们只考虑每

个量子点能级均相同的情况, 即  $h = 0$ . 图 4 中给出了量子点 c 中的自旋相关的占有数  $n_\sigma$  随量子点能级的变化. 粗线和细线分别代表自旋向上和向下, 实线、虚线、点线和点划线分别代表偏压  $V = 0, 2, 4, 6$ . 从图 4 中可以看出当量子点能级很高时, 即高于左电极中化学势  $\mu_L = V/2$  时, 电子不能进入量子点 c, 因此占有数为 0; 当量子点能级很低时, 即低于右电极中化学势  $\mu_R = -V/2$  时, 电子被量子点 c 俘获, 因此占有数为 1. 在量子点能级为负值时自旋相关占有数出现小平台, 而且小平台的数目随量子点链中量子点个数增多而增加. 这是由于量子点 c 与右电极直接耦合而与左电极通过量子点双链耦合. 这种系统结构左右不对称导致了小平台的出现. 无论  $N$  为何值, 左右两电极没有偏压时,

即  $V = 0$  时, 自旋向上和向下的占有数相互交叉, 在  $E_c = 0$  附近略有分开. 随着偏压的增大, 当量子点的能级在偏压窗口内时, 自旋向上和向下的占有数逐渐分离, 这将导致量子点 c 中较大的自旋积聚. 量子点 c 中的自旋积聚  $\Delta n$  随量子点能级的变化由图 5 中给出, 实线、虚线、点线和点划线分别代表偏压  $V = 0, 2, 4, 6$ . 从图 5 中我们可以看出当不存在偏压时, 自旋积聚在  $E_c = 0$  附近出现非常小的振荡, 而且随着  $N$  的增大, 振荡越来越多, 但是振幅逐渐减小. 当两电极间存在偏压时, 量子点 c 中出现了较大的自旋积聚, 而且自旋积聚能够在非常大的能量区域内 ( $\mu_R < E_c < \mu_L$ ) 一直保持较大的自旋积聚. 系统结构的不对称导致了量子点能级是负值时出现了小的振荡.

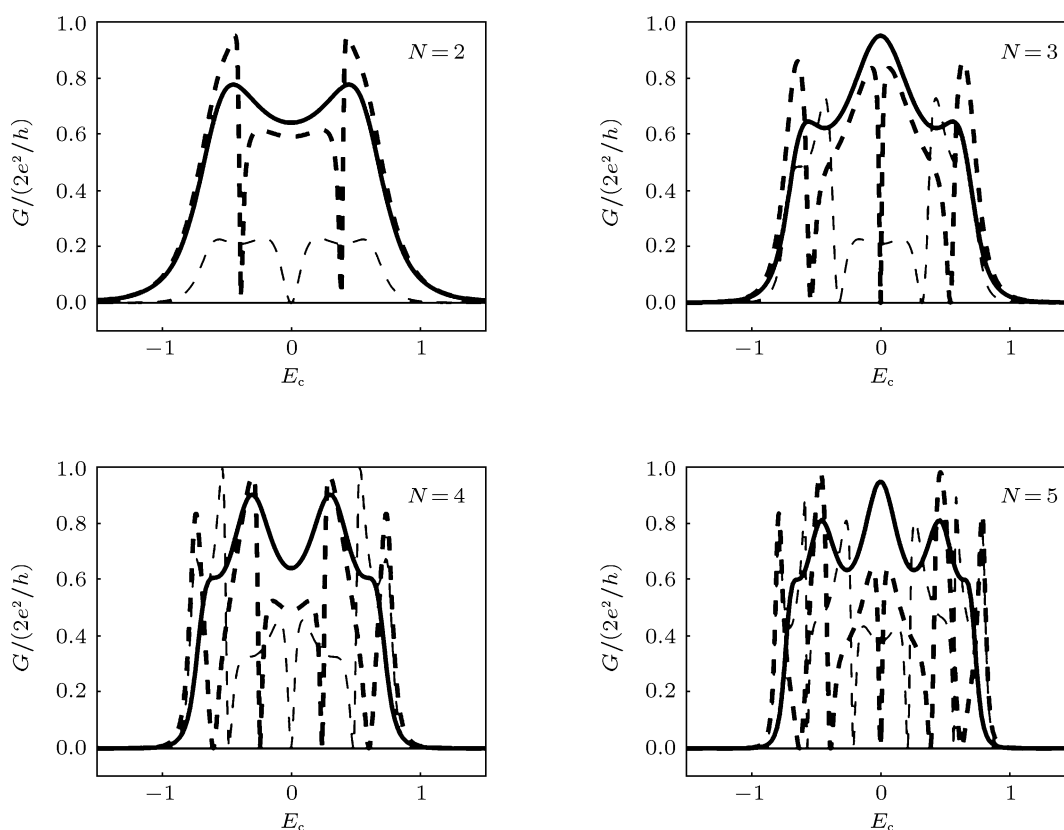


图 3 自旋相关的电导随量子点 c 能级的变化

为了更进一步研究偏压对量子点 c 中自旋积聚的影响, 我们计算了量子点 c 中自旋积聚随偏压的变化, 结果如图 6 所示. 我们假设所有量子点中能级均为 0, 即  $E_c = 0$ . 当左右两电极间的偏压为 0 时, 量子点的能级与左右化学势相对应, 无论量子点链中量子点个数为何值, 量子点 c 中都不会出现

自旋积聚. 当量子点系统处于正偏压下时, 自旋积聚随偏压的增大振荡式增大. 偏压很大时, 自旋积聚最终达到一固定值. 当量子点系统处于负偏压下时, 自旋积聚非常小, 而且随偏压的负向增大振荡式趋于 0, 这种振荡随着量子点链中量子点数目的增加, 振荡的的振幅越来越小. 当量子点链中量子

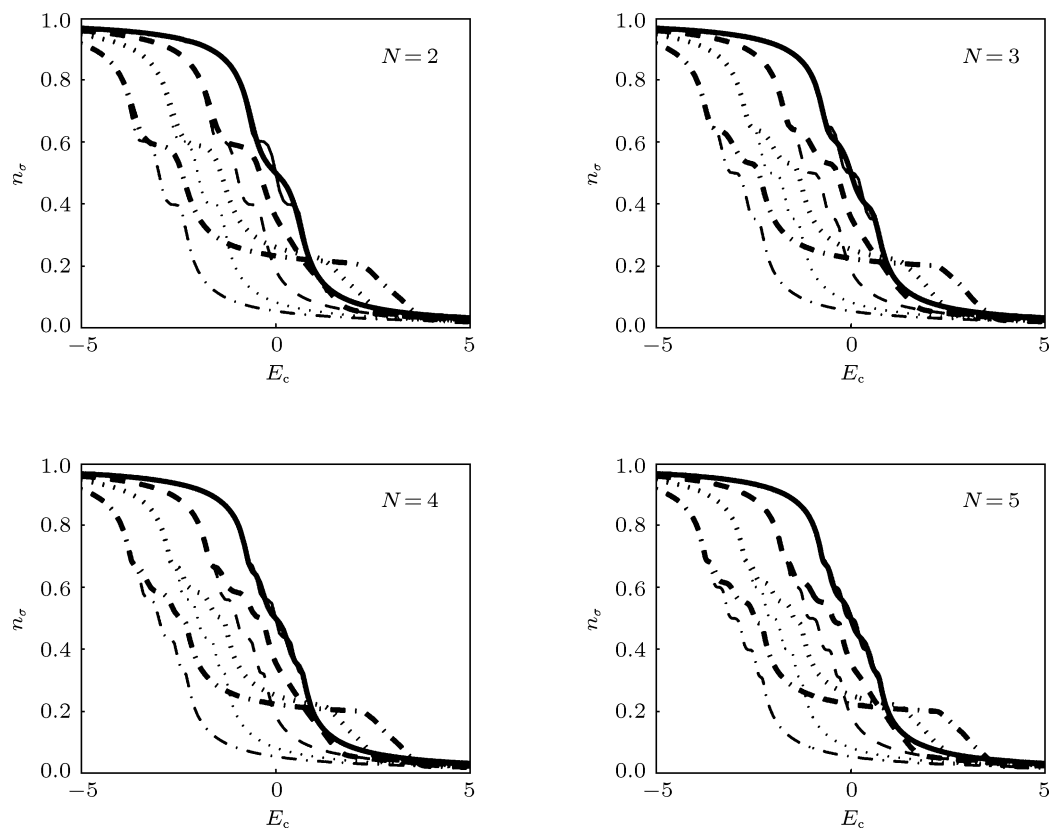


图4 量子点c中自旋相关占有数随量子点能级的变化

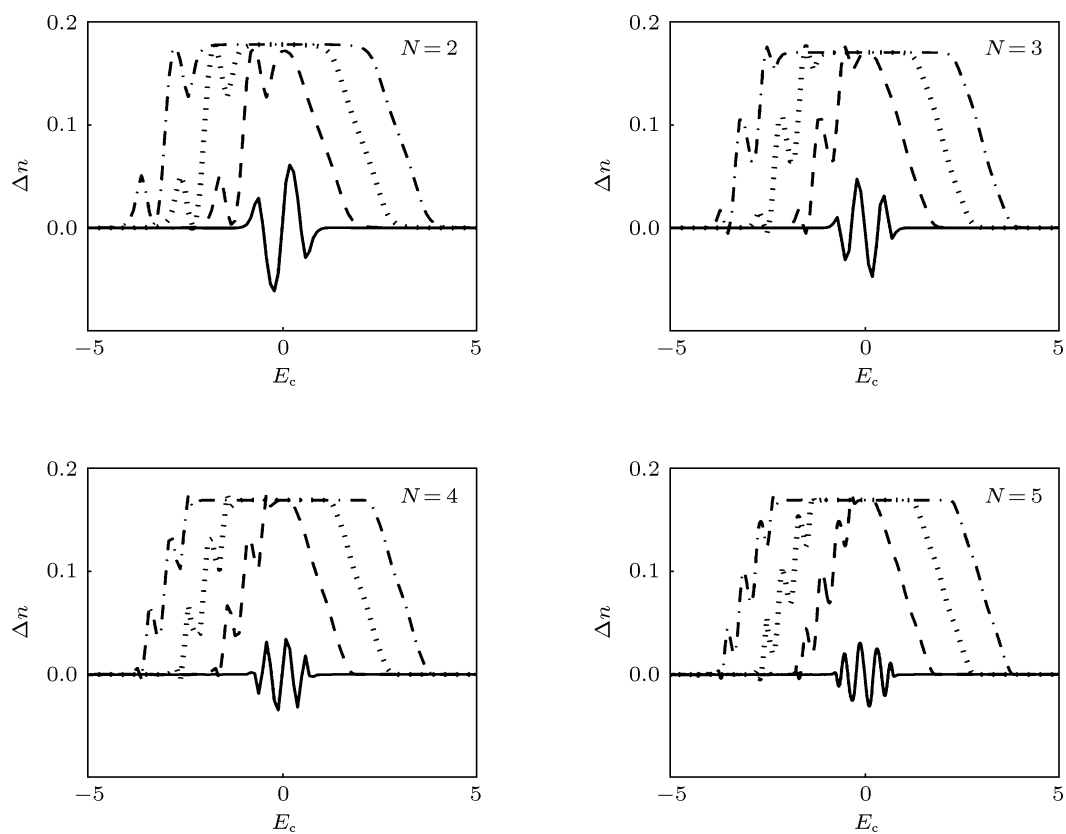


图5 量子点c中的自旋积聚随量子点能级的变化

点数目很多时, 正偏压下量子点 c 中的自旋积聚很大, 负偏压下自旋积聚为 0. 这是我们所研究的系统结构左右不对称导致的结果. 因此这样的量子点结构可以为实验上设计自旋二极管提供理论支持.

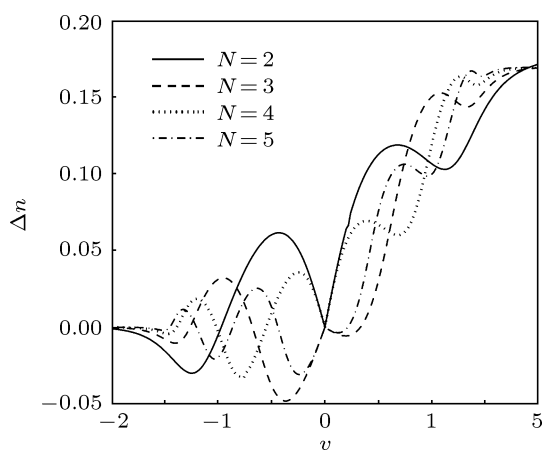


图 6 量子点 c 中的自旋积聚随偏压的变化

## 4 结论

本文利用非平衡格林函数方法研究了与单个量子点耦合的量子点双链系统中自旋相关的输运性质. 计算结果表明当上下量子点链能级存在很小的差值时, 系统的电导谱会出现类似 Dicke 效应的反共振现象; 当系统中存在磁通和 Rashba 自旋轨道耦合时, 在电极中可以得到完全自旋极化的电流, 系统可以用做自旋过滤器. 另外, 我们还研究了单个量子点中的自旋积聚, 发现左右电极间的偏压导致了量子点中较大的自旋积聚. 当量子点能级处于偏压窗口下时, 自旋积聚能够一直保持很大. 由于我们提出的量子点系统具有左右结构不对称, 因此量子点中的自旋积聚在正负偏压下完全不同, 正偏压下自旋积聚会达到一固定值, 而负偏压下自旋积聚很小, 随负偏压的增大最终变为 0. 这些计算结果将为实验上设计自旋电子学器件提供帮助.

- [1] Sun Q F, Wang J, Guo H 2005 *Phys. Rev. B* **71** 165310
- [2] Lü H F, Guo Y 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 092128
- [3] Chi F, Zheng 2008 *J. Appl. Phys. Lett.* **92** 062106
- [4] Li S S, Xia J B 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 022102
- [5] An X T, Liu J J 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 123706
- [6] He Z L, Lü T Q, Cui L, Xue H J, Li L J, Yin H T 2011 *Chin. Phys. B* **20** 117303
- [7] Buljan M, Bogdanović-Radović I, Karlušić M, Desnica U V, Dražić G, Radić N, Dubček P, Salamon K, Bernstorff S, Holý V 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 063104
- [8] Yin Y Q, Li H, Ma J N, He Z L, Wang X Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4162 (in Chinese) [尹永琦, 李华, 马佳宁, 贺泽龙, 王选章 2009 物理学报 **58** 4162]
- [9] Deng Y X, Yan X H, Tang N S 2009 *Acta Phys. Sin.* **55** 2027 (in Chinese) [邓宇翔, 颜晓红, 唐娜斯 2006 物理学报 **55** 2027]
- [10] Wu L J, Han Y, Gong W J, Tan T Y, 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 107303 (in Chinese) [吴丽君, 韩宇, 公卫江, 谭天亚 2011 物理学报 **60** 107303]
- [11] Wang Q, Liu J, Tang N, Zeng H S 2011 *Chin. Phys. B* **20** 020303
- [12] Yang M, Ran X J, Cui Y, Wang R Q 2011 *Chin. Phys. B* **20** 097201
- [13] Xia J J, Nie Y H 2011 *Chin. Phys. B* **20** 097306
- [14] Ojeda J H, Pacheco M, Orellana P A 2009 *Nanotechnology* **20** 434013
- [15] An X T, Liu J J 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 163501
- [16] An X T, Liu J J 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 223508

# Spin-polarized transport through double quantum-dot-array\*

An Xing-Tao<sup>1)2)†</sup> Mu Hui-Ying<sup>3)</sup> Xian Li-Fen<sup>1)</sup> Liu Jian-Jun<sup>4)</sup>

1) (*School of Sciences, Hebei University of Science and Technology, Shijiazhuang 050018, China*)

2) (*Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

3) (*Department of Chemistry and Environmental Engineering, Hebei Chemical and Pharmaceutical Vocational Technology College, Shijiazhuang 050026, China*)

4) (*Physics Department, Shijiazhuang University, Shijiazhuang 050035, China*)

(Received 19 December 2011; revised manuscript received 9 January 2012)

## Abstract

The spin-dependent transport through double quantum-dot-array coupled to a single quantum dot is studied by using the non-equilibrium Green function formalism. Due to the quantum interference and the spin-dependent phase induced by Rashba spin-orbit interaction, the spin of the electron through the device is polarized. When the energy level of quantum dot is in the bias window, the spin accumulation in the single quantum dot can maintain a large value in a wide range of energy and the quantum dot is largely spin polarized. The spin accumulations in the single quantum dot under positive bias and negative bias are absolutely different because of asymmetric quantum dot structure. These results is helpful for designing and fabricateing the practical spintronics devices.

**Keywords:** spin-polarized transport, quantum dot array, non-equilibrium Green's function

**PACS:** 72.25.Dc, 73.23.-b, 85.35.Ds

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11047184, 11104059, 61176089), and the Natural Science Foundation of Hebei province, China (Grant No. A2011208010).

† E-mail: anxt2005@163.com