

# 含 stubs 量子波导系统的电子自旋极化输运性质<sup>\*</sup>

肖贤波<sup>1)†</sup> 李小毛<sup>2)</sup> 陈宇光<sup>1)†</sup>

1) 同济大学物理系, 上海 200092)

2) 江西农业大学理学院, 南昌 330045)

(2009 年 3 月 20 日收到, 2009 年 4 月 11 日收到修改稿)

理论上研究了含 stubs 的 Rashba 自旋轨道耦合 (spin-orbit coupling, SOC) 量子波导系统的自旋极化输运性质. 利用晶格格林函数方法, 发现由于 stubs 和 SOC 产生的势阱使系统中出现束缚态, 这些束缚态与传播态之间相互干涉导致电导中出现 Fano 共振结构, 同时在对应的自旋极化率中也出现 Fano 共振或反共振结构. 此外, 由于系统结构的突变使电子被反向散射和量子干涉效应, 电导中出现一系列的共振峰. 但是, 当系统加上外磁场后, 所有这些效应都被抑制, 系统重新出现量子化电导, 同时自旋电导也出现台阶结构. 其物理根源是因为磁场相当于增加了一个横向限制势而使子带间的干涉效应变弱.

关键词: 量子波导, 自旋极化输运, 自旋轨道耦合

PACC: 7320D, 7225, 7170C

## 1. 引言

现代微加工技术能制造各种低维半导体结构如超晶格、量子线和量子点. 体系的结构将会破坏量子化电导而带来丰富的量子干涉现象. 比如在 T 形量子波导中的量子干涉<sup>[1]</sup>, 在弯曲的量子线中存在束缚态<sup>[2]</sup>, 在双受限体系电子出现共振隧穿<sup>[3]</sup>. 此外, 在周期性的电势调节下量子线或者含周期性结构的量子线中出现小的带隙和小的能带而且在磁场的调制下量子化电导又可以重新恢复<sup>[4-7]</sup>, 这些现象可以在实际的电子器件上带来应用.

自从 1990 年 Datta 和 Das 提出自旋场效应晶体管<sup>[8]</sup>和在实验上实现用电场来调节半导体二维电子气中 Rashba SOC 的强度<sup>[9]</sup>, 含 Rashba SOC 的低维介观系统中与自旋相关的电子输运性质得到了广泛的关注<sup>[10-21]</sup>. 因为在将来的自旋电子学器件中, 电子的自旋自由度将会取代电子的电荷自由度进行逻辑操作和信息存储. 最近, Mireles 等人<sup>[14]</sup>用数值紧束缚方法研究了准一维 Rashba 量子线的自旋极化输运性质, 在强 Rashba 自旋轨道耦合下, Rashba 子带混合使得自旋电导强烈依赖电子的入射能量. Wang 等人<sup>[20]</sup>发现如果用磁场调制, Rashba 子带混合带来

的效应可以被消除从而得到完美的可调控的自旋极化电流. 此外, Sánchez 和 Serra<sup>[22]</sup>发现空间上局域的 SOC 相当于吸引势导致在量子线中形成束缚态, 这些束缚态和传播态通过 Rashba 子带混合相互耦合形成 Rashba-Fano 效应, 即在每个子带的导通能量附近形成 Fano 共振. 本文用晶格格林函数方法计算了含有 stubs 的量子波导系统电子自旋极化输运性质, 研究了体系的结构和 Rashba SOC 对自旋极化输运性质产生影响. 我们发现体系结构和 Rashba SOC 分别导致形成两种 Fano 共振点, 当 Rashba SOC 增强时, 体系结构引起的 Fano 共振减弱而 SOC 引起的 Fano 共振增强. 此外, 在这些共振点处自旋极化率也出现一个 Fano 共振或反共振形式的突变. 当系统被磁场调制时, 这些效应全被抑制, 系统的电导重新出现量子化台阶结构而且系统的自旋电导也重新出现台阶结构.

## 2. 模型和计算方法

我们研究的量子波导系统如图 1 所示, 量子线和 stubs 周期性的排列, 两端分别连接两个半无限长的理想导线. Rashba SOC 只出现在量子线和 stubs 中, 导线中没有 SOC. 如图建立坐标系. 我们选  $y$  轴

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金 (批准号: 10774112) 和江西农业大学青年科学基金 (批准号: 2219) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: ygchen@mail.tongji.edu.cn

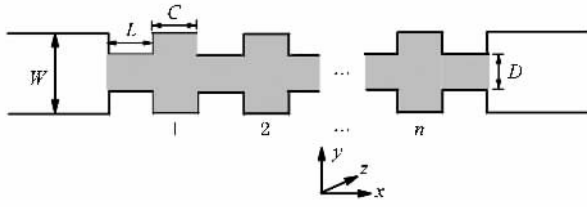


图 1 所研究量子波导结构的简图(周期排列的量子线和 stubs 两端连接这两个半无限长的理想导线. stubs 的长和宽分别为  $W$  和  $C$ , 量子线的长和宽分别为  $L$  和  $D$ , 导线的宽度为  $W$ . 灰色区域代表有 Rashba SOC)

方向的限制势为硬势. stubs 的长和宽分别为  $W$  和  $C$ , 量子线的长和宽分别为  $L$  和  $D$ , 导线的宽度为  $W$ . 把系统离散化后可以得到含 SOC 二维离散系统的紧束缚的哈密顿量<sup>[14]</sup>

$$H = \sum_{lm\sigma} \epsilon_{lm\sigma} C_{lm\sigma}^\dagger C_{lm\sigma} - t \sum_{lm\sigma} \{ C_{l+1,m\sigma}^\dagger C_{lm\sigma} + C_{l,m+1,\sigma}^\dagger C_{lm\sigma} + \text{H.c.} \} - t_{so} \sum_{lm\sigma\sigma'} \{ C_{l+1,m,\sigma'}^\dagger \mathbf{k} (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} C_{lm\sigma} - C_{l,m+1,\sigma'}^\dagger (i\sigma_x)_{\sigma\sigma'} C_{lm\sigma} + \text{H.c.} \}, \quad (1)$$

这里  $C_{lm\sigma}^\dagger$  ( $C_{lm\sigma}$ ) 是  $(lm)$  格点上自旋为  $\sigma$  的产生(湮没)算符,  $\epsilon_{lm\sigma} = 4t$  是格点能,  $t = \hbar^2/2m^* a^2$  为格点之间的势能,  $m^*$  和  $a$  分别为电子的有效质量和晶格常数.  $t_{so} = \alpha/2a$  表示 Rashba SOC 强度. 当在  $z$  轴方向加上磁场时, 则  $x$  轴方向最近邻格点间的势能出现一个 Peierl 相因子

$$T_{lm,lm+1} = t \exp(i\hbar\omega_c l/2t) = (T_{lm+1,lm})^*; \quad T_{lm,l+1m} = (T_{l+1m,lm})^* = t, \quad (2)$$

这里  $\omega_c = eB/m^* c$  为回旋频率,  $B$  为磁场强度. 我们选择矢势  $\mathbf{A} = (By, 0, 0)$  以保证在  $x$  轴方向上的平移对称性. 同样的, 加上磁场后对 Rashba SOC 强度  $t_{so}$  也要做相似的变换. 这里不考虑外磁场引起的泽曼效应.

在弹道输运中, 系统电导由 Landauer-Büttiker<sup>[23]</sup> 公式给出. 根据非平衡格林函数<sup>[24]</sup>, 两终端系统计入自旋的电导为

$$G^{\sigma\sigma'}(\epsilon_F) = \frac{e^2}{h} \text{Tr} [ \Gamma_L^\sigma G_r^{\sigma\sigma'} \Gamma_R^{\sigma'} G_a^{\sigma'\sigma} ], \quad (3)$$

这里  $\Gamma_{I(R)} = [ \sum_{I(R)}^a - \sum_{I(R)}^a ]$ ,  $\sum_{I(R)}^r = (\sum_{I(R)}^a)^*$  是左右两导线引起的自能,  $G_{I(a)}$  是整个系统计入自能的推迟(超前)格林函数,  $\text{Tr}$  表示对整

个空间自由度求迹. 系统总的格林函数可以用递归的方法求得<sup>[25,26]</sup>. 在下面的计算中, 所有能量将以格点间的势能  $t$  作为能量单位 ( $t = 1$ ). 系统的结构参数为  $W = 20a$ ,  $C = 10a$ ,  $D = 10a$ ,  $L = 10a$ . 选  $z$  轴为自旋量子化轴. 假定只有自旋向上的电子从左边导线射入含 SOC 区域, 在该区域电子自旋将产生进动然后进入右边导线. 我们定义电导为  $G^e = G^{\uparrow\uparrow} + G^{\uparrow\downarrow}$ , 自旋电导为  $G^s = G^{\uparrow\uparrow} - G^{\uparrow\downarrow}$ , 自旋极化率为  $P = (G^{\uparrow\uparrow} - G^{\uparrow\downarrow}) / (G^{\uparrow\uparrow} + G^{\uparrow\downarrow})$ .

### 3. 数值结果和讨论

图 2(a)–(c) 是系统在不同 Rashba SOC 强度下, 系统的电导和随电子入射能量的变化, 图 2(d)–(f) 是对应的自旋极化率随电子入射能量的变化.  $t_{so}$  分别为 0, 0.02, 0.08.  $n = 1$ . 从图 2(a) 图可以看出当系统没有 SOC 时, 在入射能量  $E = 0.284$  处, 系统电导出现一个‘山谷’形状的结构. 这是由于 stub 引起的势阱使系统中形成束缚态, 这些束缚态与连续态之间相互干涉导致的 Fano 共振<sup>[27]</sup>. 当系统中加上 Rashba SOC 后, 在  $E = 0.157$  处电导出现一个新的‘针尖’结构(见图 2(b) 的插图). 这是由于 Rashba SOC 引起的势阱导致系统中形成新的束缚态, 这些束缚态与连续态通过 Rashba 子带间混合相互作用导致另一种形式的 Fano 共振. 当 Rashba SOC 强度增大时, 由它引起的势阱增大, 所以由 SOC 引起的 Fano 共振‘针尖’结构得到加强而由结构引起的 Fano 共振‘山谷’结构被抑制, 同时两者的位置都向低能区移动. 有趣的是, 从图 2(d)–(f) 中可以看出在电导出现 Fano 共振的位置自旋极化率也出现 Fano 共振或反共振结构, 其幅度大小随着 SOC 的增大而加强. 此外, 当 SOC 强度较弱时, 除了共振点外自旋极化率不随入射能量变化, 这是因为 Rashba 子带间的混合很小而可以忽略不计. 但是当 SOC 强度较强时, 由于 Rashba 子带间混合较大而不能忽略不计, 所以自旋极化率随着电子的入射能量变化而变化.

图 3(a)–(c) 是系统在不同 stub 个数下电导随电子入射能量的变化, 图 3(d)–(f) 是对应的自旋极化率随电子入射能量的变化.  $n$  分别为 1, 4, 7.  $t_{so} = 0.02$ . 从图 3(a)–(c) 可以看出, 随着  $n$  的增加, 电导和自旋极化率出现 Fano 共振或反共振的位置不变, 仍然是在  $E = 0.157$  和  $E = 0.284$  处. 但是结

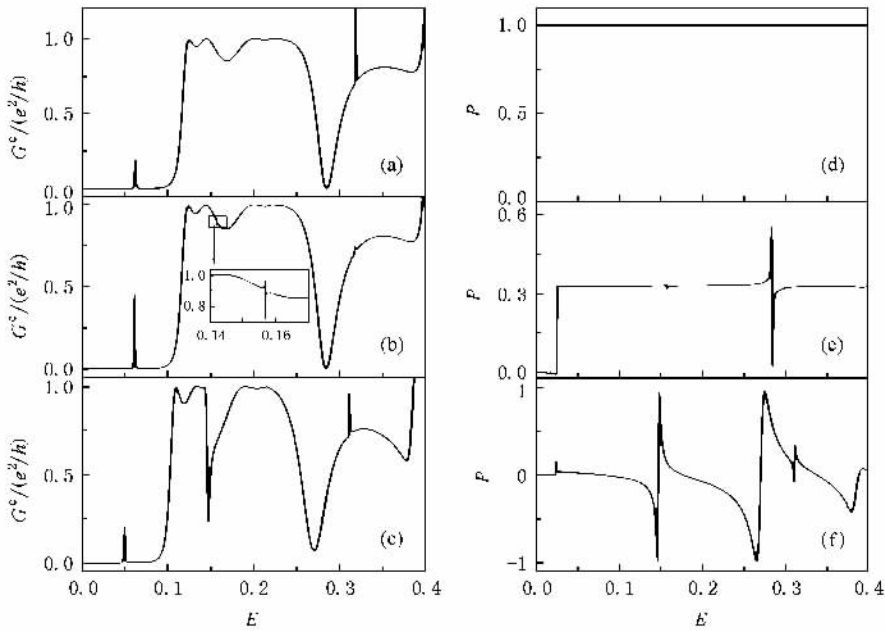


图 2 (a)–(c) 不同 Rashba SOC 强度下系统电导随电子入射能量的变化,  $t_{so}$  分别为 0, 0.02, 0.08. (d)–(f) 分别对应 (a)–(c) 图的自旋极化率随电子入射能量的变化. 系统的结构参数为:  $W = 20 a$ ,  $C = 10 a$ ,  $D = 10 a$ ,  $L = 10 a$ . stub 的个数  $n = 1$

构引起的电导‘山谷’和 SOC 引起的电导‘针尖’结构都得到加强, 特别是在结构导致的 Fano 共振点附近出现一个小的带隙.  $n$  越大带隙的宽度也随着增大. 在图 3(c) 中, 当  $0.284 < E < 0.310$  时系统电

导  $G^e = 0$  而当  $E > 0.310$  时  $G^e \approx 1$ , 而且其对应的自旋极化率  $P = 1$  (见图 3(f)), 即自旋向上的电子经过系统后仍为自旋向上的电子. 根据这个性质, 我们可以用这样的系统来设计自旋晶体管.

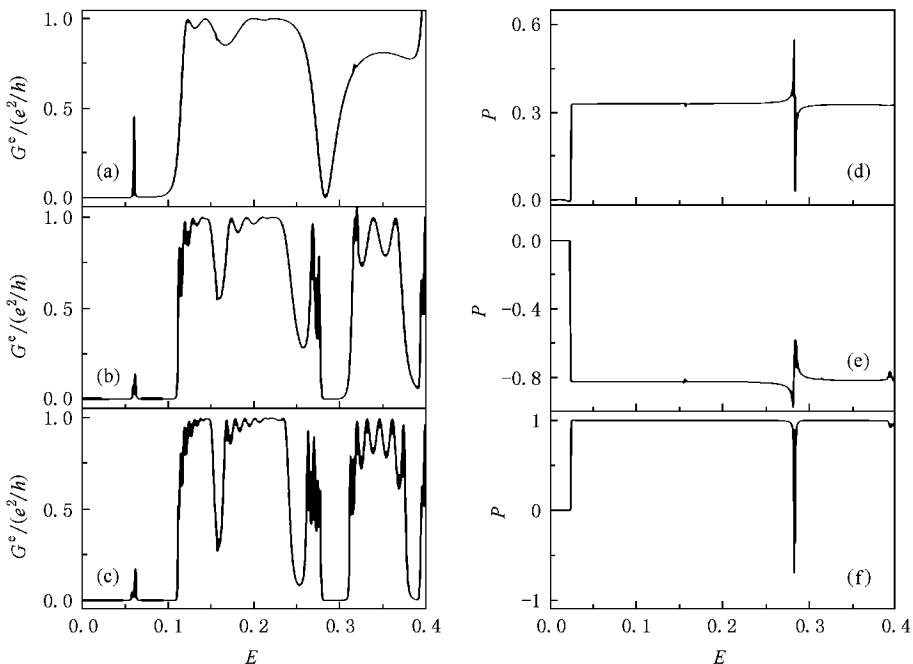


图 3 (a)–(c) 不同 stub 个数下系统电导随电子入射能量的变化,  $n$  分别为 1, 4, 7. (d)–(f) 分别对应 (a)–(c) 图的自旋极化率随电子入射能量的变化.  $t_{so} = 0.02$

图 4(a)–(c) 是系统在不同磁场强度下电导随电子入射能量的变化, 图 4(d)–(f) 是对应的自旋电导随电子入射能量的变化.  $\hbar\omega_c$  分别为 0, 0.4, 0.8.  $t_{so} = 0.02$ ,  $n = 1$ . 从图 4(a) 可以看出, 不加磁场时, 由于体系结构的突变使得电子被向后散射而产生量子干涉, 因此电导中出现许多共振峰. 同时与图 2(b) 相似, 电导中还出现一系列的‘山谷’和‘针尖’结构. 但是, 当系统加上磁场后, 体系结构和 Rashba SOC 所引起的效应被抑制. 当磁场强度增大时, 系统从新出现量子化的电导台阶 (见图 4(b) 和 (c)). 这是因为加上磁场后形成朗道能级, 子带之

间的距离被拉开, 因此子带间的混合和干涉效应被削弱. 除了重新出现量子化的电导台阶之外, 在每个子带刚导通的能量处电导会出现一些振荡. 这是由于外加的磁场在系统中形成一个环形的边带, 电子在到达右边导线之前在量子线和 stub 中经过多次反射, 导致了 Aharonov-Bohm 效应的量子干涉<sup>[28]</sup>. 振动的周期由波矢和反射区的长度决定. 因为在子带刚导通处的波矢最小所以该处的振荡越明显<sup>[20]</sup>. 有趣的是, 随着磁场的增强自旋电导也出现台阶结构, 体系结构和 SOC 导致的 Fano 共振都被磁场抑制. 这是因为磁场相当于在  $y$  轴方向增加了一

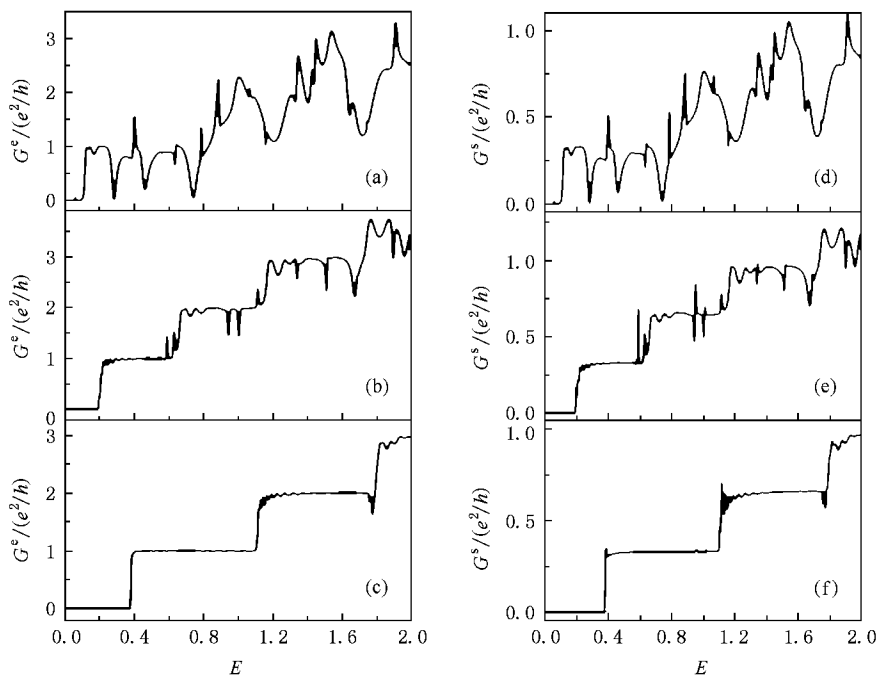


图 4 (a)–(c) 不同磁场强度下系统电导随电子入射能量的变化,  $\hbar\omega_c$  分别为 0, 0.4, 0.8. (d)–(f) 分别对应 (a)–(c) 图的自旋电导随电子入射能量的变化.  $t_{so} = 0.02$ ,  $n = 1$

个限制势使得子带间的干涉效应变小.

## 4. 结 论

用晶格格林函数方法, 计算了含 stubs 的 Rashba SOC 量子波导系统的自旋极化输运性质. 计算发现: 1) stubs 和 Rashba SOC 导致系统电导出现 Fano 共振形式的‘山谷’和‘针尖’结构, 通过改变 SOC 的强度可以调节它们的大小. 同时在同样的位置自旋

极化率也出现 Fano 共振或反共振结构. 2) 当系统中出现多个周期性的 stubs 时, 在 Fano 共振点附近电导中出现一些小的带隙结构. 这个性质也许可以用来设计自旋晶体管. 3) 当系统加上磁场后, stubs 和 Rashba SOC 带来的效应都被抑制, 系统的电导重新出现量子化台阶结构. 同时由于子带间干涉效应变小, 自旋电导也出现台阶结构. 这些结果对基础物理和将来自旋电子器件的应用都具有很重要的意义.

- [ 1 ] Sols Fernando , Macucci , Ravaioli U , Hess Karl 1989 *J. Appl. Phys.* **66** 3892
- [ 2 ] Wang C K , Jiang Z T 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1574 ( in Chinese )  
[ 王传奎、江兆潭 2000 物理学报 **49** 1574 ]
- [ 3 ] Weisshaar Andreas , Lary Jenifer , Goodnick Stephen M , Tripathi Vijai K 1991 *J. Appl. Phys.* **70** 355
- [ 4 ] Xu H Q 1995 *Phys. Rev. B* **52** 5803
- [ 5 ] Nikolić , Šordan 1998 *Phys. Rev. B* **58** 9631
- [ 6 ] Gu B Y , Zhang Y , Wang X H 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 300
- [ 7 ] Chen Y P , Yan X H , Lu M W , Deng Y X 2004 *Chin. Phys.* **13** 1537
- [ 8 ] Datta S , Das B 1990 *Appl. Phys. Lett.* **56** 655
- [ 9 ] Nitta J , Akazaki T , Takayanagi H 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1335
- [ 10 ] Moroz A V , Barnes C H W 1999 *Phys. Rev. B* **60** 14272
- [ 11 ] Grundler D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 6074
- [ 12 ] Moroz A V , Samokhin K V , Barnes C H W 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4164
- [ 13 ] Tang H X , Monzon F G , Lifshitz Ron , Cross M C , Roukes M L 2000 *Phys. Rev. B* **61** 4437
- [ 14 ] Mireles F , Kirzenow G 2001 *Phys. Rev. B* **64** 024426
- [ 15 ] Governale M , Zillicke U 2002 *Phys. Rev. B* **66** 073311
- [ 16 ] Larsen Morten Høgsbro , Lunde A Mathias , Karsten Flensberg 2002 *Phys. Rev. B* **66** 033304
- [ 17 ] Wang X F 2004 *Phys. Rev. B* **69** 035302
- [ 18 ] Pershin Yuriy V , Nesteroff James A , Privman Vladimir 2004 *Phys. Rev. B* **69** 121306( R )
- [ 19 ] Schäpers Th , Knobbe J , Guzenko V A 2004 *Phys. Rev. B* **69** 235323
- [ 20 ] Wang J , Sun H B , Xing D Y 2004 *Phys. Rev. B* **69** 085304
- [ 21 ] Tang Z K , Wang L L , Tang L M , You K M , Zhou B S 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5899 ( in Chinese ) [ 唐振坤、王玲玲、唐黎明、游开明、邹炳锁 2008 物理学报 **57** 5899 ]
- [ 22 ] Sánchez D , Serra L 2006 *Phys. Rev. B* **74** 153313
- [ 23 ] Büttiker M 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 1761
- [ 24 ] Pareek T P , Bruno P 2001 *Phys. Rev. B* **63** 165424-1  
Molenkamp L W , Schmidt G , Bauer G E W 2000 *Phys. Rev. B* **62** 4790
- [ 25 ] Lee P A , Fisher D S 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 882
- [ 26 ] Ando T 1991 *Phys. Rev. B* **44** 8017  
McLennan M J , Lee Y , Datta S 1991 *Phys. Rev. B* **43** 13846  
Baranger H U , Divincenzo D P , Jalaber R A , Stone A D 1991 *Phys. Rev. B* **44** 10637
- [ 27 ] Xu H Q , Sheng W D 1998 *Phys. Rev. B* **57** 11903
- [ 28 ] Yoshioka H , Nagaoka Y 1990 *J. Phys. Soc. Jpn.* **59** 2884  
Takagaki Y , Ferry D K 1993 *Phys. Rev. B* **47** 9913

## Spin-polarized transport in quantum waveguide systems with attached stubs<sup>\*</sup>

Xiao Xian-Bo<sup>1,2)</sup> Li Xiao-Mao<sup>2)</sup> Chen Yu-Guang<sup>1)†</sup>

1) *Department of Physics , Tongji University , Shanghai 200092 , China*

2) *College of Science , Jiangxi Agricultural University , Nanchang 330045 , China*

( Received 20 March 2009 ; revised manuscript received 11 April 2009 )

### Abstract

We theoretically studied the spin-polarized electron transport properties of quantum waveguide systems with attached stubs in the presence of Rashba spin-orbit coupling (SOC) by the lattice Green function approach. It is shown that the structure-induced Fano resonance and SOC-induced Fano resonance exist in the charge conductance in consequence of the bound states interfering with the conductance states. At the same time, the Fano resonance and antiresonance structures are also found in the spin polarization. In addition, due to the effect of quantum interference and backscattering caused by abrupt change of quantum wire width, a series of resonant peaks and dips appear in the charge conductance and spin conductance. However, all these effects are suppressed and quantization plateau is recovered in the charge conductance and spin conductance when applying a magnetic field to the system. The underlying physics is that the effect of the magnetic field is equivalent to the enhancement of the lateral confining potential, which reduces the intersubband mixing.

**Keywords** : quantum waveguide , spin-polarized transport , spin-orbit coupling

**PACC** : 7320D , 7225 , 7170C

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10774112 ), and the Science Foundation for Young Scientists of Jiangxi Agricultural University ( Grant No. 2219 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : ygchen@mail.tongji.edu.cn