分类号 _____ 密级 _____

UDC _____ 编号 _____

中国科学院研究生院
博士学位论文

低维量子系统中的可控自旋相互作用

朱家骥

指导教师 常凯 研究员

中国科学院半导体研究所

指导教师（联合） F. M. Peeters 教授

比利时安特卫普大学物理系

申请学位级别 博士 学科专业名称 凝聚态物理

论文提交日期 2011 年 5 月 论文答辩日期 2011 年 6 月

培养单位 中国科学院半导体研究所

学位授予单位 中国科学院研究生院

答辩委员会主席 _____

Controllable spin-spin interactions in low-dimensional quantum systems

Jia-Ji Zhu

Supervisor:

Prof. Kai Chang[1]

Co-Superviser:

Prof. F. M. Peeters[2]

[1]Institute of Semiconductors,
Chinese Academy of Sciences, China
[2]Department of Physics,
University of Antwerp, Belgium

June, 2011

Submitted in total fulfilment of the requirements for the degree of Ph.D. in Condensed Matter Physics

独 创 性 说 明

本人郑重声明：所呈交的论文是我个人在导师指导下进行的研究工作及取得研究成果。尽我所知，除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其他人已经发表或撰写的研究成果，也不包含为获得中国科学研究院或其他教育机构的学位或证书所使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中做了明确的说明并表示了谢意。

签名：_____ 日期：_____

关于论文使用授权的说明

本人完全了解中科院半导体所有关保留、使用学位论文的规定，即：所内有权保留送交论文的复印件，允许论文被查阅和借阅；所内可以公布论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存论文。

（保密的论文在解密后应遵循此规定）

签名：_____ 导师签名：_____ 日期：_____

摘　　要

本文基于非平衡格林函数理论研究各种介观体系中的 RKKY 相互作用。全文共分五章，分别研究半导体量子线中的电控 RKKY 相互作用、拓扑绝缘体表面上的电控磁性以及石墨烯 PN 结上门电压控制的磁性。

第一章和第五章分别为绪论 (自旋电子学和 RKKY 相互作用简介) 和总结。

第二章应用格林函数理论研究了同时考虑 Rashba 和 Dresselhaus 两种自旋轨道耦合的准一维电子气，我们利用电场调节巡游电子的自旋轨道耦合参数，从而控制其自旋分布，并进而利用这些巡游电子通过 RKKY 间接相互作用机制来传递磁耦合，实现对磁杂质或局域自旋的电控制。我们具体分析了系统中 RKKY 相互作用对外加电场和材料晶向的依赖特性，提出这种特性可以被用来构建各种不同的自旋模型，并且实际构造了一个包含超相干量子比特的量子计算方案。

第三章继续前项研究所开辟的方向，本章中研究了最新发现的拓扑绝缘体材料（或反转能带半导体）中电控制的表面磁性。我们给出了三维拓扑绝缘体表面态上 RKKY 相互作用的严格的解析解。由于拓扑绝缘体上独特的自旋极化和手征特性，使得仅通过电场调节费米能就能实现对巡游狄拉克电子自旋分布的影响，从而最终实现电控制的磁相互作用。利用拓扑绝缘体表面态上的 RKKY 相互作用，我们可以构建各种不同于前项研究的模型。我们还研究了在这些模型下丰富的自旋构形和相应的反常霍尔效应以及自旋波激发。

第四章进一步把电控制的磁性研究扩展到石墨烯器件中。石墨烯材料具有迁移率高、系统的频率响应速度快等优点，我们把电控制的磁性机制推广到了石墨烯器件上，将对实际的自旋电子学器件的实现起到重要作用。RKKY 相互作用在普通石墨烯上是难以被调控的，我们引入了偏转 PN 结的结构，十分漂亮地实现了电控制的磁性，并且可以通过门电压的大小和偏转角两个因素来调节，具有很高的可控性。

关键词： RKKY 相互作用，半导体量子线，自旋轨道耦合，拓扑绝缘体，石墨烯

Abstract

In this thesis, we investigate theoretically RKKY interaction untilizing Green's function methods in various mesoscopic systems. The thesis consists of five chapters, in which we study electrically controllable RKKY interaction in semiconductor quantum wires, electrically controllable surface magnetism on the surface of topological insulators, and gate-controlled magnetism in graphene p-n junctions, respectively.

In Chapters 1 and 5 we introduce the emerging field of spintronics and the research history of RKKY interaction, and give the conclusions of the thesis, respectively.

In Chapter 2, we demonstrate in theory that it is possible to all-electrically manipulate the RKKY interaction in a quasione-dimensional electron gas embedded in a semiconductor heterostructure, in the presence of Rashba and Dresselhaus spin-orbit interaction. In an undoped semiconductor quantum wire where intermediate excitations are gapped, the interaction becomes the short-ranged Bloembergen-Rowland(BR) superexchange interaction. Owing to the interplay of different types of spin-orbit interaction, the interaction can be controlled to realize various spin models, e.g., isotropic and anisotropic Heisenberg-like models, Ising-like models with additional Dzyaloshinskii-Moriya(DM) terms, by tuning the external electric field and designing the crystallographic directions. Such controllable interaction forms a basis for quantum computing with localized spins and quantum matters in spin lattices. We also implement a quantum computation scheme with a supercoherence qubit.

In Chapter 3, we study theoretically the RKKY interaction between magnetic impurities on the surface of threedimensional topological insulators, mediated by the helical Dirac electrons. Exact analytical expression shows that the RKKY interaction consists of the Heisenberg-like, Ising-like, and DM-like terms. It provides us a new way to control surface magnetism electrically. The gap opened by doped magnetic ions can lead to a short-range BR interaction. The

competition among the Heisenberg, Ising, and DM terms leads to rich spin configurations and an anomalous Hall effect on different lattices. We also study the spin wave excitation on the surface of three-dimensional topological insulator.

In Chapter 4, we investigate the RKKY interaction between local spins in a tilted graphene p-n junction. Analytical expressions are obtained for the RKKY interaction in various local spin configurations for both abrupt and gradual p-n junctions. We show that we can manipulate electrically the RKKY interaction by changing the strength and/or the tilt angle of the gate. The p-n junction strongly enhances the tunability of the RKKY interaction. This spin-spin interaction could be used to implement a quantum computation scheme in graphene electronics and pave the way for high-speed electrical manipulation of graphene based magnetic devices.

Keywords: RKKY interaction, semiconductor quantum wire, spin-orbit coupling, topological insulator, graphene

目　　录

摘 要 **iii**

Abstract **v**

目 录 **vii**

第一章　导论 **1**

1.1　自旋电子学简介 1

1.2　RKKY 交换相互作用机制简介 4

1.3　本论文的组织结构和研究意义 6

第二章　半导体量子线中的电控 RKKY 相互作用 **13**

2.1　引言 13

2.2　自旋轨道耦合与 RKKY 相互作用 14

2.3　RKKY 相互作用与自旋模型 16

2.4　RKKY 相互作用与量子计算 19

2.5　短程 RKKY 相互作用与其他 22

2.6　本章小结 23

第三章　拓扑绝缘体表面上的电控表面磁性 **31**

3.1　引言 31

3.2　拓扑绝缘体表面态与 RKKY 相互作用 33

3.3　能隙打开、弯曲效应与 RKKY 相互作用 36

3.4　自旋构形与反常霍尔效应 37

3.5　三维拓扑绝缘体表面的自旋波 38

3.6　本章小结 40

第四章 石墨烯 PN 结上门电压控制的磁性 **45**
4.1 引言 45
4.2 RKKY 相互作用与石墨烯 PN 结 45
4.2.1 突变型石墨烯 PN 结的 RKKY 相互作用 46
4.2.2 渐变型石墨烯 PN 结的 RKKY 相互作用 52
4.3 本章小结 53

第五章 结论 **57**

附录 A Dresselhaus 自旋轨道耦合效应在不同晶面和晶向的表达式 **59**
A.1 (001) 面 59
A.2 (110) 面 62
A.3 (111) 面 64

附录 B 利用非平衡格林函数导出 RKKY 相互作用公式 **67**

附录 C 实验室坐标系下 RKKY 相互作用形式与有效磁场坐标系下的转换 **69**

附录 D (111) 晶面中为达到可控参数条件所需的外加电场强度 **73**
D.1 GaAs 73
D.2 InAs 74
D.3 InSb 75
D.4 $Hg_{0.74}Cd_{0.26}Te$ 75

发表文章目录 **79**

致 谢 **81**

第一章　导论

1.1　自旋电子学简介

20 世纪 50 年代末以来，随着半导体制造工业的快速发展，半导体器件的尺寸急速减小，运算速度迅速增加。半导体晶片上的晶体管已经快速逼近纳米尺度。但是，当晶体管尺寸进一步减小时，由于量子约束效应，电子的输运特性不同于传统晶体管中的电子输运，而与此同时，随着晶体管尺度的减小，集成度增加，器件引起的热耗散也急剧增加，这些因素成为制约半导体电子工业进一步发展的障碍。

虽然人们很早就研究了电子的内禀自旋，但是电子自旋特征在实际中的应用并未受到相应的重视。几乎所有的电子器件都只应用了电子的电荷特性来进行运算。自 A. Fert 研究小组于 1988 年在 (Fe / Cr) 多层膜中发现了巨磁电阻效应以后 [1]，电子自旋对于电子输运的影响以及相关的其他特性迅速成为国际上的研究热点，并发展出了电子学的最新分支——自旋电子学 [2–4]。所谓自旋电子学，就是研究如何开发和利用晶体中电子的自旋自由度，操控电子自旋进行信息的存储，编码，获取，处理，传输和量子计算等问题的学科。

自旋电子学有着广泛的应用前景，基于自旋自由度得天独厚的优势，可预计未来的自旋电子学器件将比传统的电子学器件有如下优点:

a. 特征能量较小（参见图 1.1）：对自旋的操作是通过施加有效磁场来进行的，涉及的特征能量为自旋的 Zeeman 能，在微电子伏（μeV）量级；而对电荷的操作是通过 Coulomb 相互作用来完成的，其特征能量为库仑能，在毫电子伏（meV）量级。操作自旋小得多的特征能量意味着自旋电子学器件的功耗将远远小于传统电子学器件。

b. 不易挥发性，即记忆信息无须能量维持：对于传统电子器件，只要环境能量涨落超过器件工作能量，所存储的信息就会被破坏。而对自旋器件。由于角动量守恒的约束，自旋状态的改变必须与环境发生角动量交换才能实现。这使得自旋器件存储的信息不易被破坏，具有不易挥发性。

c. 集成密度大：电荷之间的库仑相互作用是长程的，作用范围在 10 nm。而局域自旋之间的相互作用是短程的，作用范围只有 1 nm。因而在保障单个器件之间互不干扰的前提下，自旋器件的可集成密度大一个量级。

d. 携带信息量大：自旋是个理想的二能级系统，而电荷是一个标量，因而前者能携带的信息大于后者。

e. 相干时间长：电子的轨道自由度与环境（电荷，声子，光场）的耦合很强，因而电荷自由度的量子相干性很容易被破坏。相反，自旋与环境的耦合小，因而自旋相干时间远远超过电荷相干时间，自旋相干输运长度已经超过 100 μm [5]。

f. 量子效应丰富：自旋态的相干与纠缠，有着丰富的物理内涵。这些奇特的量子效应，为超快量子计算提供了可能性。

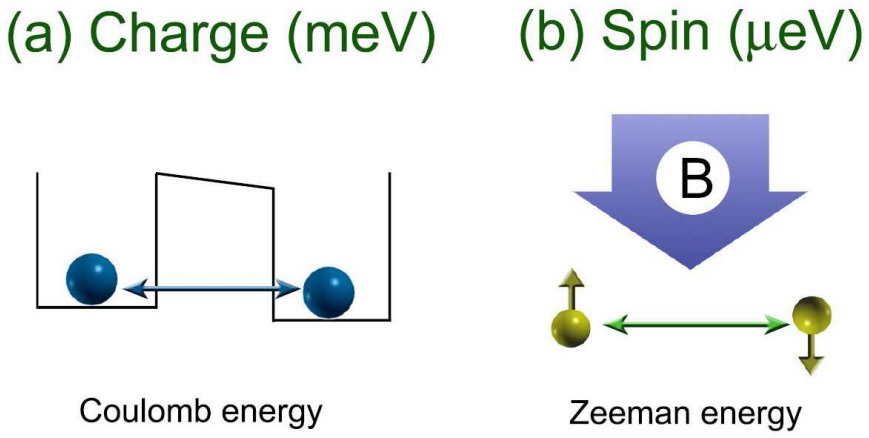

图 1.1: 电荷与自旋自由度的特征能量示意图。电荷自由度的特征能量为库仑能（$\sim$ meV）。自旋自由度的特征能量是 Zeeman 能（$\sim$ μeV）。

在实际应用中，自旋电子学器件以巨磁阻器件最为成功，目前超高密度硬盘的磁头都利用了巨磁阻效应。这种新型读写头空间分辨率大幅度提升，读写速度加快，磁盘单碟容量迅速增长。自旋阀晶体管 [6, 7]、磁性随机访问存储器 [8–10] 以及磁隧道结 [11, 12] 等也取得了巨大的成功。在半导体中，人们设想

不用外磁场，而利用电场来实现自旋控制和运算。Datta 和 Das 提出了一种理想的场效应管 [13]，即利用外加门电压来改变自旋轨道耦合强度，来控制自旋进动，从而改变自旋极化电子的透过率。Datta 和 Das 自旋场效应管结构如图 1.2 所示。其工作原理如下，首先通过源电极产生自旋极化的电子，如果门电压为 V_0，这些电子通过两极之间，自旋极化方向不偏转，可以通过漏电极（如图 1.2 (a) 所示）；如果门电压为 V_1，这些电子通过两极之间时其自旋将偏转 180°，无法通过漏电极，（如图 1.2 (b) 所示）。这样就实现了场效应管的“开”和“关”。

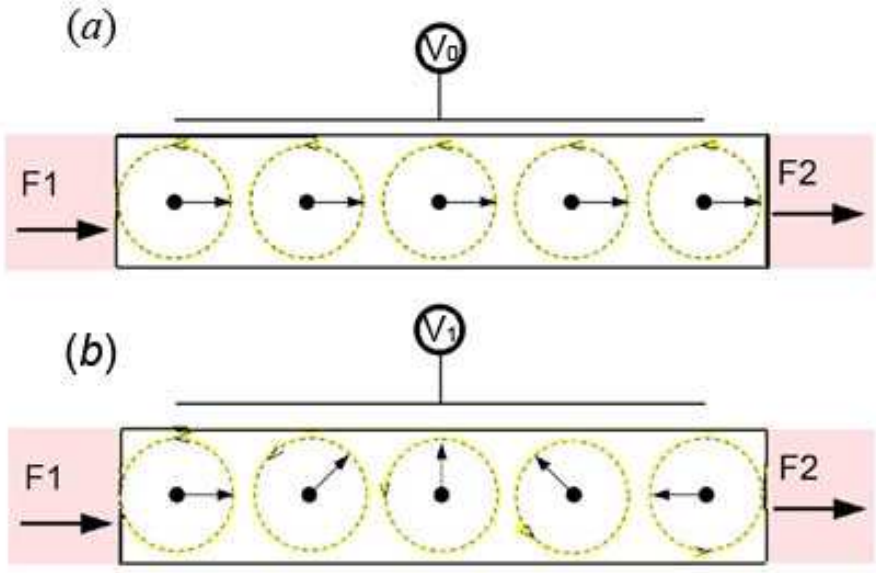

图 1.2: 理想的 Datta-Das 自旋场效应管示意图。源极 F1 和漏极 F2 为铁磁材料或半导体材料，其产生的载流子自旋完全极化。两极间半导体材料的 Rashba 自旋轨道耦合强度通过门电压来控制。图 (a) 是高透过情况，图 (b) 是低透过情况。

由于制造工艺的限制，对于铁磁金属自旋电子器件，很难实传统微电子、光电子器件的一体化集成，甚至实现大规模集成制造都有一定困难。而半导体材料中的自旋相干长度远大于金属材料中的自旋相干长度，半导体的制造工艺也十分成熟，便于实现磁 - 光 - 电一体化的集成器件，因而国际上自旋电子学的研究主要集中于半导体自旋电子学。在目前半导体自旋电子学的研究中，有一个很重要的问题，那就是如何利用电场调控系统中的磁性物质，例如磁杂

质、磁性缺陷、磁吸附原子以及极化局域电子等等。如果能够实现对磁性的电调控，那么我们就可以很容易实现器件的大规模集成制造，也很容易解决在一般自旋电子学器件中相当困难的自旋极化的产生、注入、操控和收集等问题。

1.2 RKKY 交换相互作用机制简介

物质具有各种磁性，包括铁磁性、反铁磁性、亚铁磁性以及如螺旋磁性等非共线磁结构。为了解释铁磁体内的磁有序排列，外斯提出了分子场假说，奈尔建立了反铁磁性和亚铁磁性的分子场理论。海森堡引入量子力学中电子的交换关联联合电子自旋的相对取向，最终解释了铁磁体内磁有序结构的现象，揭示了之前的分子场假说实质上是电子之间交换相互作用的一种平均场近似。海森堡交换作用模型的建立，为铁磁性量子理论的发展奠定了基础。之后，人们逐步发展起了自旋波理论、铁磁相变理论和铁磁共振理论。

不同的物质产生交换作用的机理也是不同的。磁性氧化物中的交换作用是通过氧离子为媒介的间接交换相互作用。稀土金属和合金中是以传导电子为媒介的 RKKY 相互作用。1954 年，茹德曼和基特尔在解释 Ag^{110} 在核磁共振实验中吸收线增宽现象时，引入了核自旋与传导电子自旋间的交换相互作用 [14]。他们认为，这种交换作用使传导电子的自旋极化，导致了核自旋之间的相互作用，从而增加了共振线宽。后来糟谷在研究 Mn-Cu 合金的核磁共振超精细结构时推广了上述模型 [15]，认为 Mn 原子中的 d 电子与传导电子之间的交换作用使不同 Mn 原子的 d 电子之间产生了间接交换作用。芳田则导出了局域电子自旋感应的传导电子的自旋密度变化 [16]。因此，上述理论通常称为 RKKY 理论。这一理论提出了局域电子之间通过传导电子作媒介而产生交换作用的机制。这一机制解释了稀土金属及其合金中的交换作用。后来又被广泛地应用到包含少量磁杂质的各类系统中，例如稀磁半导体，成功的解释了诸如自旋玻璃等各种物理现象。近年来，人们已经在半导体介观系统中通过局域自旋间的间接相互作用实现了非局域的自旋控制 [17]。

RKKY 相互作用一直是磁性研究领域令人感兴趣的课题之一。近年来关于这个问题的研究依然保持活跃状态。Brey 等研究了掺杂和非掺杂石墨烯里局域磁矩间的 RKKY 相互作用 [18]。他们发现在前一种情形中位于确定子格点的磁矩间的相互作用随 $1/R^2$ 减小，而位于格点空隙中的磁矩间的相互作用则随 $1/R^3$ 减小。这些相互作用在等价子格点间主要是铁磁的，而在不等价子格点

间则主要是反铁磁的，这表明在低温下石墨烯上的稀磁矩能够形成一个类似于稀反铁磁体中的成序态。在非掺杂情形，他们发现基态中没有净磁矩。Saremi 提出了一个对任意半满双成分晶格都成立的简单证明 [19]，即在不同子格点的杂质间 RKKY 相互作用是反铁磁的，而在相同子格点则是铁磁的。这一结论在任意尺度下都成立。然后聚焦于六角晶格并利用狄拉克费米子的低能计算在长程极限下检查了这一定理。为了得到普适（无截断）的结果，他在计算中应用了平滑截断方式。Kindermann 预言在石墨烯上甚至子格点形成的赝自旋之间也可能有类似于 RKKY 相互作用特性的交换相互作用 [20]。Szałowski 把 RKKY 相互作用的常规狄拉克 δ 函数接触势替换为任意分布接触势，并推导了分别适用于一维、二维和三维系统中 RKKY 交换积分的公式 [21]。其中一个结果表明接触势的“扩散”移除了零距 RKKY 积分的非物理性发散并获得了依赖于分布宽度的有限值。Smirnov 研究了交换相互作用有限半径对 RKKY 自旋振荡的影响 [22]。他考虑了有限温度下一维环上无相互作用的电子气，局域自旋被置于环上的某些点，设自旋和电子之间的相互作用是交换相互作用，即 RKKY 间接交换效应的基础。当电子数量足够大时，他发现与传统上用于 RKKY 效应的模型的零相互作用半径相比，任意小但是有限的半径总能够造成自旋密度振荡的变化。RKKY 振荡的幅度在电子气中电子数增加时其振荡被压制，这种压制会在相互作用半径变大时进一步增强。Zhou 等发现在研究由非磁性材料表面吸附的各别磁性原子组成的磁纳米结构时，连续性 RKKY 模型可能会引起误解 [23]。他们测量了各吸附原子间磁耦合的原子级精确的映射，并直接与第一性计算的结果比较。Smirnov 研究了有限程交换相互作用诱导的 RKKY 振荡中巡游载流子的质量修正 [24]。系统由半无限一维量子线与其端点的磁杂质构成。不同于点状交换相互作用的常规模型，在这类系统中巡游载流子自旋密度的振荡是存在的。他解析地求出当交换相互作用的半径小于费米面处巡游载流子的波长时，振荡的长程行为与无限一维量子线中相同的交换相互作用在零半径极限下的振荡长程行为相同，这里的无限一维量子线与起初的半无限系统相比，巡游载流子的质量被交换相互作用的半径强烈修正。基于他的分析，他认为上述 Zhou 的实验所显示的表面 RKKY 相互作用的方向性问题中，RKKY 相互作用的各向异性一般说来不仅源于巡游载流子费米面的各向异性，而且源于磁杂质的运载自旋的原子轨道的各向异性。Black-Schaffer 在六角晶格上用精确对角化的方法研究了石墨烯里的 RKKY 耦合 [25]。利用石墨烯的紧束缚最近邻能带结构避免了在狄拉克连续模型中因使用动量截断而

给微扰论结果造成的困难。他展示了杂质间距离的短程和长程行为，它们与之前长程极限下的结果定性相符，但也有一些新结果。在体材料中，RKKY 耦合与 $1/|\mathbf{R}|^3$ 成正比并有一个 $[1+cos(2\mathbf{k}_D\cdot\mathbf{R})]$ 型的振荡。A-A 子格点间耦合总是铁磁的而 A-B 子格点间耦合总是反铁磁的并且三倍于前者。他还研究了锯齿形石墨烯纳米带的边缘效应，发现由于局域化的零能边缘态的存在，边缘的杂质其 RKKY 耦合呈指数衰减，因而得出结论：对边缘杂质的非微扰处理是必要的。对于石墨烯纳米带中的杂质，其 RKKY 耦合特性与体材料中的相同。在另一篇文献中，Black-Schaffer 展示了石墨烯中 RKKY 耦合在考虑电子电子相互作用时会有重要修正 [26]。在 Hubbard-U 模型的平均场近似下，他展示了在电子电子相互作用增强时 RKKY 振荡趋于消失而且其幂律衰减变得更加长程。在锯齿状石墨烯纳米带里这些效应在任意有限 U 值下更加明显，并使得 RKKY 耦合不依赖于其距离。因为 RKKY 耦合直接与磁化率成正比，这些结果对石墨烯上任何与磁性相关的物理性质都很重要。把这个平均场结果与第一原理计算结果相比较，他还发现特别大的 U 值暗示石墨烯非常接近于反铁磁不稳定性。

1.3 本论文的组织结构和研究意义

本文基于非平衡格林函数理论研究各种介观体系中的 RKKY 相互作用。主要探索利用 RKKY 相互作用机制对系统磁性实现电学调控，同时探索了这种调控可能的有趣应用，例如量子计算、自旋构形、自旋统计模型演示平台等。

第二章应用格林函数理论研究了同时考虑 Rashba 和 Dresselhaus 两种自旋轨道耦合的准一维电子气，我们利用电场调节巡游电子的自旋轨道耦合参数，从而控制其自旋分布，并进而利用这些巡游电子通过 RKKY 间接相互作用机制来传递磁耦合，实现对磁杂质或局域自旋的电控制。我们具体分析了系统中 RKKY 相互作用对外加电场和材料晶向的依赖特性，提出这种特性可以被用来构建各种不同的自旋模型，并且实际构造了一个包含超相干量子比特的量子计算方案。这项研究开辟了电控制的磁相互作用的方向，为利用局域自旋建构量子计算和在自旋阵列中研究量子相变提供了基础。

第三章继续前项研究所开辟的方向，本章中研究了最新发现的拓扑绝缘体材料（或反转能带半导体）中电控制的表面磁性。我们给出了三维拓扑绝缘体

表面态上 RKKY 相互作用的严格的解析解。由于拓扑绝缘体上独特的自旋极化和手征特性，使得仅通过电场调节费米能就能实现对巡游狄拉克电子自旋分布的影响，从而最终实现电控制的磁相互作用。利用拓扑绝缘体表面态上的 RKKY 相互作用，我们可以构建各种不同于前项研究的模型。我们还研究了在这些模型下丰富的自旋构形和相应的反常霍尔效应以及自旋波激发。这项研究为实现人工控制的强关联系统提供了理论基础。

第四章进一步把电控制的磁性研究扩展到石墨烯器件中。石墨烯材料具有迁移率高、系统的频率响应速度快等优点，如果我们能把电控制的磁性机制推广到石墨烯上，对实际的自旋电子学器件的实现将起到重要作用。RKKY 相互作用在普通石墨烯上是难以被调控的，我们引入了偏转 PN 结的结构，十分漂亮地实现了电控制的磁性，并且可以通过门电压的大小和偏转角两个因素来调节，具有很高的可控性。

参考文献

[1] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, and F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices, Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).

[2] Michael L. Roukes, Electronics in a spin, Nature **411**, 747 (2001).

[3] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Moln ́ r, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, D. M. Treger, Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future, Science **294**, 1488 (2001).

[4] Igor Zutic, Jaroslav Fabian, and S. Das Sarma, Spintronics: Fundamentals and applications, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).

[5] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom. Lateral drag of spin coherence in gallium arsenide. Nature **397**, 139.

[6] S. S. P. Parkin and D. Mauri, Spin engineering: Direct determination of the Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida far-field range function in ruthenium, Phys. Rev. B **44**, 7131 (1991).

[7] S. S. P. Parkin, in Spin Dependent Transport in Magnetic Nanostructures (ed. S. Maekawa and T. Shinjo), pp. 237, Taylor and Francis, New York, 2002.

[8] S. Tehrani, B. Engel, J. M. Slaughter, E. Chen, M. DeHerrera, M. Durlam, P. Naji, R. Whig, J. Janesky, and J. Calder, Recent developments in magnetic tunnel junction MRAM, IEEE Trans. Magn. **36**, 2752 (2000).

[9] U. Hartman, Magnetic Multilayers and Giant Magnetoresistance, Springer, Berlin, 2000.

[10] G. H. Koh, H. J. Kim, W. C. Jeong, J. H. Oh, J. H. Park, S. Y. Lee, G. T. Jeong, I. J. Hwang, T. W. Kim, J. E. Lee, H. J. Kim, S. O. Park, U. I. Jeong, H. S. Jeong, and Kinam Kim, Fabrication of high performance 64 kb MRAM, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **272**, 1941 (2004).

[11] C. I. Duruz, R. M. Clarke, C. M. Marcus, and J. S. Harris, Jr, Conduction Threshold, Switching, and Hysteresis in Quantum Dot Arrays, Phys. Rev. Lett. **74**, 3237 (1995).

[12] Jagadeesh S. Moodera, Janusz Nowak, and Rene J. M. van de Veerdonk, Interface Magnetism and Spin Wave Scattering in Ferromagnet-Insulator-Ferromagnet Tunnel Junctions, Phys. Rev. Lett. **80**, 2941 (1998).

[13] S. Datta and B. Das, Electronic analog of the electro-optic modulator, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).

[14] M. A. Ruderman, C. Kittel, Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons, Phys. Rev. **96**, 99 (1954).

[15] T. Kasuya, A theory of metallic ferro- and antiferromagnetism on Zerner's model, Prog. Theor. Phys. Japan(Kyoto) **16**, 45 (1956).

[16] Kei Yosida, Magnetic Properties of Cu-Mn Alloys, Phys. Rev. **106**, 893 (1957).

[17] N. J. Craig, J. M. Taylor, E. A. Lester, Tunable nonlocal spin control in a coupled quantum dot system, Science **304**, 565 (2004).

[18] L. Brey, H. A. Fertig and S. Das Sarma, Diluted Graphene Antiferromagnet, Phys. Rev. Lett. **99**, 116802 (2007).

[19] Saeed Saremi, RKKY in half-filled bipartite lattices: Graphene as an example, Phys. Rev. B **76**, 184430 (2007).

[20] M. Kindermann, Nonequilibrium Effective Vector Potential due to Pseudospin Exchange in Graphene, Phys. Rev. Lett. **101**, 226809 (2008).

[21] Karol Szałowski and Tadeusz Balcerzak, RKKY interaction with diffused contact potential, Phys. Rev. B **78**, 024419 (2008).

[22] Sergey Smirnov, Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida spin density oscillations: Impact of the finite radius of the exchange interaction, Phys. Rev. B **79**, 134403 (2009).

[23] Lihui Zhou, Jens Wiebe, Samir Lounis, Elena Vedmedenko, Focko Meier, Stefan Blügel, Peter H. Dederichs and Roland Wiesendanger, Strength and directionality of surface Ruderman – Kittel – Kasuya – Yosida interaction mapped on the atomic scale, Nat. Phys. **6**, 187 (2010).

[24] Sergey Smirnov, Mass modification of itinerant carriers in RKKY oscillations induced by finite-range exchange interactions, Phys. Rev. B **81**, 214425 (2010).

[25] Annica M. Black-Schaffer, RKKY coupling in graphene, Phys. Rev. B **81**, 205416 (2010).

[26] Annica M. Black-Schaffer, Importance of electron-electron interactions in the RKKY coupling in graphene, Phys. Rev. B **82**, 073409 (2010).

第二章　半导体量子线中的电控 RKKY 相互作用

2.1　引言

对半导体中电子和磁离子的自旋自由度作全电量子操控是自旋电子学和量子信息处理领域的中心课题之一 [1–7]。半导体中的电子自旋具有相干时间长、自旋翻转耗能小等优点 [8]，因而在固态量子信息处理方面有明显优势。这固态量子信息处理中，电子和磁离子的自旋是量子比特的最佳候选 [9–11]。束缚在相邻量子点的两电子间的海森堡型交换相互作用可以通过改变两电子的交叠波函数实现电场控制 [12]。然而，这样一来相邻量子点间的距离就成为决定交换相互作用强度的关键因素。为了在量子纠错中达到更低的阈值，人们就需要一种作用在两个量子比特上的相干长程相互作用。光场能够提供实际的方法通过腔模 [13, 14] 和光生激子或电子中介的交换相互作用实现远程的耦合 [15–17]。光控可以在飞秒过程中实现并且具有很强的抗退相干性。然而，激光束光斑大小的限制妨碍了光控下量子比特的集成。因此，设计一种可以被电调控的、基于两自旋间远程耦合的量子门成为人们自然的想法。

RKKY 相互作用是半导体或金属中局域自旋间以巡游电子为中介的间接交换相互作用 [18–21]。这里的局域自旋可以是量子点里的磁离子或电子自旋 [22–25]。一个特别有趣的系统是掺入一个与巡游电子有很强 s-d 交换相互作用的磁离子的量子点 [1]。由于 RKKY 相互作用是由巡游电子为媒介的交换相互作用，所以自旋轨道耦合效应是不可避免的。在普通闪锌矿结构半导体中存在两种类型的自旋轨道耦合，一个是由于晶格反演对称性破缺引起的 Dresselhaus 自旋轨道耦合，另一个是结构对称性破缺引起的 Rashba 自旋轨道耦合 [26–28]。自旋轨道耦合是自旋退相干的主要肇因之一，而且在相关的交换相互作用中引起各向异性 [19, 29]。RKKY 相互作用中源于自旋轨道耦合的这种各向异性正是我们用以实现各种自旋相互作用的电控制的资源，而这样的资源在无自旋轨道耦合的系统里是没有的。

在接下来的几节里，我们把注意力集中在半导体异质结上实现自旋链或自旋格点的可能性。目前电子束平版印刷技术的发展水平使得编织这一结构成为可能。我们在理论上展示了自旋轨道耦合能够被用来对自旋自旋相互作用的对

称性类型实现电控制。RKKY 相互作用的解析形式表明了通过改变 Rashba 自旋轨道耦合和 Dresselhaus 自旋轨道耦合的强度实现不同量子自旋模型的可能性。比如说，我们可以实现各向同性海森堡模型、各向异性海森堡模型和类伊辛模型。通过上述自旋自旋相互作用耦合起来的人造自旋格点或自旋链内含着丰富的量子相，有待我们进一步探索。

2.2 自旋轨道耦合与 RKKY 相互作用

首先我们考虑分别位于 R_1 和 R_2 的两个局域自旋 $\mathbf{S}_1$ 和 $\mathbf{S}_2$。这两个自旋之间以计入 Rashba 和 Dresselhaus 两种自旋轨道耦合效应的量子线上占据最低子能带的电子作为媒介。系统的哈密顿量包括两个部分——单粒子部分 H_0 和 s-d 交换相互作用部分 H_1:

$$H = H_0 + H_1, \tag{2.1a}$$

$$H_0 = \sum_{k,\eta} E_{k\eta} c^{\dagger}_{k\eta} c_{k,\eta}, \tag{2.1b}$$

$$H_1 = J \sum_{k,q,i,\eta,\eta'} e^{-iqR_i} c^{\dagger}_{k+q,\eta'} c_{k,\eta} \boldsymbol{\sigma}_{\eta'\eta} \cdot \mathbf{S}_i, \tag{2.1c}$$

其中 $c_{k\eta}$ 消灭一个带准动量 k 和自旋 η 的电子，$\boldsymbol{\sigma}$ 代表泡利矩阵，J 是巡游电子和局域自旋间的 s-d 交换相互作用的强度。

由于自旋轨道耦合的存在，由单粒子哈密顿量 $H_0 = \hbar^2 k^2/2m^* + V(y) + H_{\mathrm{SO}}$ 所决定的无相互作用电子能量 $E_{k\eta}$ 是依赖于自旋的。上面的 $V(y)$ 沿 y 轴的电子横向限制势，m^* 是电子有效质量。自旋轨道耦合项 $H_{\mathrm{SO}} = \mathbf{B}_{\mathrm{eff}}(k) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 等价于动量依赖的有效磁场 $\mathbf{B}_{\mathrm{eff}}(k)$。有效磁场的方向依赖于晶面，其强度在线性自旋轨道耦合区正比于准动量。例如，对于典型的晶面 (001)、(110) 和 (111)，其有效磁场按顺序分别为 $\mathbf{B}_{\mathrm{eff}} = k(\beta, -\alpha, 0)$, $k(0, -\alpha, -\beta/2)$, and $k(0, -\alpha + 2\beta/\sqrt{3}, 0)$（见表 3.1），其中 α 和 β 分别是 Rashba 自旋轨道耦合和 Dresselhaus 自旋轨道耦合的强度（见附录 A）。如果我们选择有效磁场方向为自旋的量子化方向 z'，则能带劈裂为两条（见图 2.1(c)）

$$E_{k,\pm} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(k \pm \frac{Q}{2} \right)^2, \tag{2.2}$$

其最小值在动量空间中的迁移为

$$\pm Q/2 \equiv \left(m^*/\hbar^2\right) B_{\text{eff}}(k)/k, \tag{2.3}$$

正号代表自旋平行于 z' 轴，负号代表自旋反平行于 z' 轴。

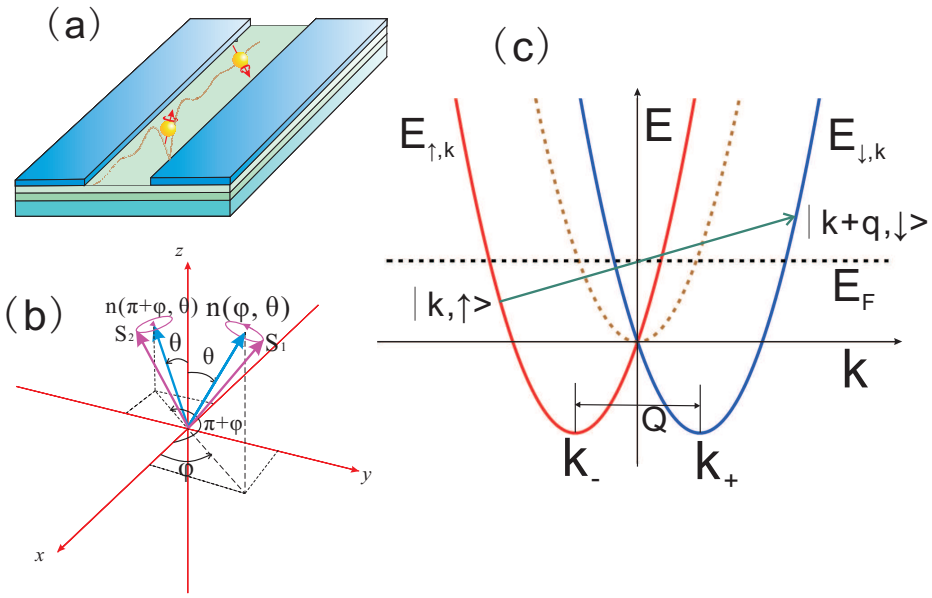

图 2.1: (a) 考虑自旋轨道耦合效应的量子线中两局域自旋的示意图, 两局域自旋间以电控制的 RKKY 相互作用耦合起来。(b) 扭曲的 RKKY 相互作用中角度 θ 和 φ 在自旋空间中的示意图。(c) 考虑自选轨道耦合效应时自旋劈裂的电子能带。虚线代表无自旋轨道耦合时的电子能带。箭头指示的是自旋翻转的散射。

我们利用格林函数方法可以得到计算 RKKY 相互作用的二阶微扰公式 [30]（见附录 B）

$$\begin{aligned} H_{1,2}^{RKKY} &= \frac{2}{\pi}\mathrm{Im}J^2 \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \mathrm{d}\varepsilon \mathrm{Tr}[(\mathbf{S}_1\cdot\boldsymbol{\sigma})G(R_{12};\varepsilon+i0^+) \\ &\quad \times(\mathbf{S}_2\cdot\boldsymbol{\sigma})G(-\mathbf{R}_{12};\varepsilon+i0^+)], \end{aligned} \tag{2.4}$$

其中 ε_F 是考虑自旋轨道耦合时从电子能带的能量极小值开始量度的费米能，$R_{12} \equiv R_1 - R_2$。Tr 表示对巡游电子的自旋部分求迹。选取有效磁场 $\mathbf{B}_{\text{eff}}$ 方向为自旋量子化轴 z' 的方向时，RKKY 相互作用的形式为

$$H_{1,2}^{RKKY} = F_1\left(q_F\left|R_{12}\right|\right)\left(S_1^{z'}S_2^{z'} + \frac{1}{2}S_1'^{+}S_2'^{-}e^{i2\theta} + \frac{1}{2}S_1'^{-}S_2'^{+}e^{-i2\theta}\right), \tag{2.5}$$

其中 $q_F=\sqrt{2m^*\varepsilon_F/\hbar^2}$ 是每个从能带底部量度起的自旋劈裂带的费米波矢，相角为 $\theta\equiv Q\left|R_{12}\right|/2$，程函数为

$$F_1\left(q_F\left|R_{12}\right|\right)=\frac{4J^2}{\pi}\frac{m^*}{\hbar^2}\left[\mathrm{Si}\left(2q_F\left|R_{12}\right|\right)-\frac{\pi}{2}\right], \tag{2.6}$$

$\mathrm{Si}(x)$ 是正弦积分函数。RKKY 相互作用的不同项的物理过程可以被很清晰的描述：公式 (2.5) 中的第一项代表每个自旋劈裂带内自旋守恒的散射过程，因此与无系统在自旋轨道耦合时的相应项有完全相同的形式 [31, 32]。第二项和第三项相应于在不同的自旋劈裂带之间的自旋翻转散射，相因子 $e^{\pm i2\theta}=e^{\pm iQR_{12}}$ 是通过额外的动量转移 Q 在 R_{12} 的路径上积累的相移，Q 是两个劈裂能带之间在动量空间的距离。公式 (2.5) 中的 RKKY 相互作用的表达式对任意晶面和量子线方向都是适用的。

表 2.1: 角 θ 和 φ 描述不同晶面上 Rashba 自旋轨道耦合与 Dresselhaus 自旋轨道耦合的影响。

晶面	H_0	φ	θ
(001)	$H_0^{(001)}=\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}+\alpha(\mathbf{k}\times\widehat{\mathbf{z}})\cdot\boldsymbol{\sigma}+\beta\left(\mathbf{k}\cdot\widehat{\mathbf{x}}\right)\left(\sigma\cdot\widehat{\mathbf{x}}\right)$	$\arctan(\frac{\beta}{\alpha})$	$\frac{m^*}{\hbar^2}\sqrt{\alpha^2+\beta^2}\lvert R_{12}\rvert$
(110)	$H_0^{(110)}=\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}+\alpha(\mathbf{k}\times\widehat{\mathbf{z}})\cdot\boldsymbol{\sigma}-\frac{\beta}{2}\left(\mathbf{k}\cdot\widehat{\mathbf{x}}\right)\left(\sigma\cdot\widehat{\mathbf{z}}\right)$	$\pi-\arctan(\frac{\beta}{2\alpha})$	$\frac{m^*}{\hbar^2}\sqrt{\alpha^2+\frac{\beta^2}{4}}\lvert R_{12}\rvert$
(111)	$H_0^{(111)}=\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}+(\alpha-\frac{2}{\sqrt{3}}\beta)(\mathbf{k}\times\widehat{\mathbf{z}})\cdot\boldsymbol{\sigma}$	0	$\frac{m^*}{\hbar^2}(\frac{2}{\sqrt{3}}\beta-\alpha)\lvert R_{12}\rvert$

2.3 RKKY 相互作用与自旋模型

我们回到实验室参考系下讨论问题，上一节里的 RKKY 相互作用可以变换为（见附录 C）

$$\begin{aligned}H_{1,2}^{RKKY}=&F_1\left(q_F\left|R_{12}\right|\right)\left\{\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2-2S_{1z}S_{2z}\right.\\&\left.+2\left[\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{n}\left(\pi+\varphi,\theta\right)\right]\left[\mathbf{S}_2\cdot\mathbf{n}\left(\varphi,\theta\right)\right]\right\},\end{aligned} \tag{2.7}$$

其中 $\mathbf{n}\left(\varphi,\theta\right)=\left(\cos\varphi\sin\theta,\sin\varphi\sin\theta,\cos\theta\right)$。表 2.1 中给出的角 θ 和角 φ 依赖于量子线所处的具体晶面。角 θ 描述 Rashba 自旋轨道耦合和 Dresselhaus 自旋轨道耦合如何把两个局域自旋扭转偏离 z 轴，角 φ 则决定自旋取向的平面内扭转 (见图 2.1(b))。如果我们不考虑 Dresselhaus 自旋轨道耦合效应，则结果与之间的工作是一致的 [19]。

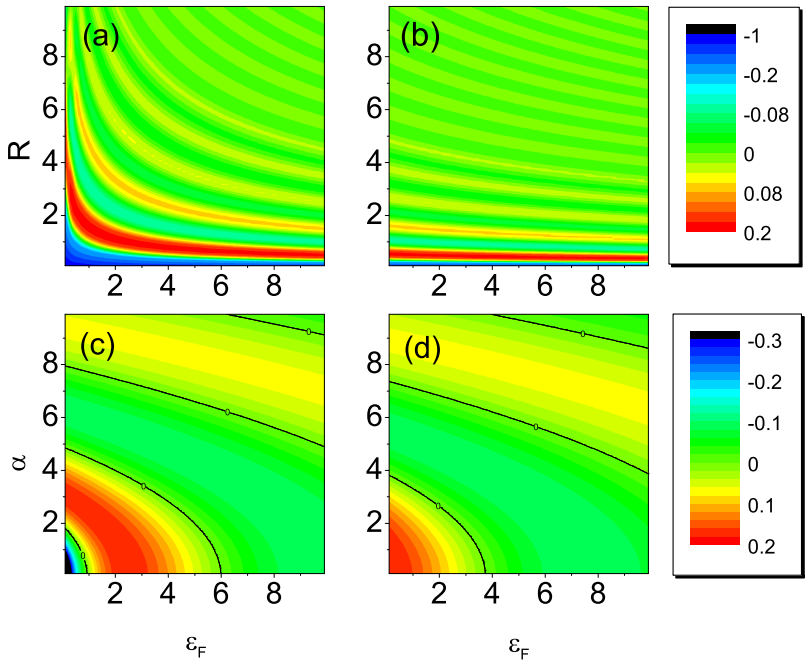

图 2.2: RKKY 相互作用程函数对费米能 ε_F 和局域自旋间距 R 的依赖。(a) 常规 RKKY 相互作用 $\alpha = 0, \beta = 0$，(b) 考虑 Rashba 自旋轨道耦合和 Dresselhaus 自旋轨道耦合的 RKKY 相互作用 $\alpha = 5, \beta = 3$。(c) 不考虑 Dresselhaus 自旋轨道耦合时，程函数对费米能 ε_F 和 Rashba 自旋轨道耦合强度 α 的依赖，(d) 考虑 Dresselhaus 自旋轨道耦合 $\beta = 3$ 时的情形。黑线指示 RKKY 相互作用为零处所在。以上所有参数都是无量纲化的。

有两个主要因素决定了同时具有 Dresselhaus 和 Rashba 两种自旋轨道耦合效应的系统有很强的可控性：一是两种类型的自旋轨道耦合的相互作用，二是 Dresselhaus 自旋轨道耦合对晶面和量子线方向的敏感依赖。公式 (2.7) 对除了 (110) 晶面以外的所有晶面都有效。对于沿 [110] 方向生长的异质结上的量子线，RKKY 相互作用的形式变为

$$H\left(\varepsilon_F\right)^{RKKY} = F_1\left(q_F\left|R_{12}\right|\right)\left\{\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2 - 2S_{1x}S_{2x} + 2\left[\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{n}\left(\pi+\varphi,\theta\right)\right]\left[\mathbf{S}_2\cdot\mathbf{n}\left(\varphi,\theta\right)\right]\right\} \tag{2.8}$$

这里 $\mathbf{n}(\varphi,\theta)$ 必须通过交换 x 和 z 指标重新定义。当量子线置于 (111) 晶面时，

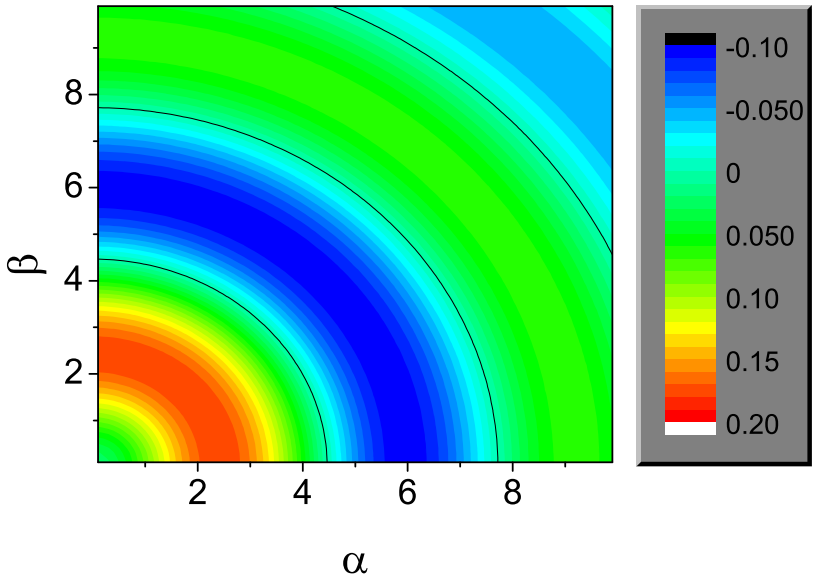

图 2.3: 在固定费米能和局域自旋间距 $\varepsilon_F = 1, R = 1$ 时，RKKY 相互作用的程函数随 Rashba 自旋轨道耦合强度和 Dresselhaus 自旋轨道耦合强度的变化。

如果我们调节参数使 $\alpha = 2\beta/\sqrt{3}$，则 RKKY 相互作用表现出各向同性的行为。这是因为在 (111) 晶面上，Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合效应对平面内波矢的依赖关系是相同的（见表 3.2）。这表明我们有可能按照我们的需要打开或者关闭自旋轨道耦合效应 [33]。

当量子线放置在 (001) 面的任意晶向时，也就是说置于相对 [100] 方向的夹角为 ϑ 时，RKKY 相互作用的形式保持不变，但是角 θ 和角 φ 必须被重新定义如下：

$$\theta \equiv m^* \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta \sin 2\vartheta}\, |R_{12}| / \hbar^2, \tag{2.9}$$

$$\varphi \equiv \arctan\left[\beta \cos 2\vartheta / (\alpha + \beta \sin 2\vartheta)\right] \tag{2.10}$$

注意当 (001) 面上量子线沿 $[\bar{1}10]$ 方向时，$\theta \propto |\alpha - \beta|$ 且 $\varphi = 0$，这将给出另外一种途径通过调节外加电场强度开关自旋轨道耦合效应。

我们的结果与之前的工作 [15–17] 之间最大的不同在于—— Rashba 自旋轨

道耦合与 Dresselhaus 自旋轨道耦合之间的相互作用给了我们一种新的方法来控制自旋自旋相互作用。由于这样一种自旋轨道耦合之间的相互作用，RKKY 相互作用除了具有通常的海森堡型的交换项，而且还有伊辛型的各向异性项和扭转局域自旋的扭曲的 Dzyaloshinsky-Moriya (DM) 型项（见公式 (2.7) 第三项）。

调节参数 θ 和 φ，我们能够在自旋空间中旋转局域自旋（见图 2.1(b)），并构建各种量子自旋模型。从公式 (2.7) 出发，我们通过调节自旋轨道耦合效应的强度（见表 2.2）实现了各种自旋模型，例如各向同性海森堡模型 $F_1(q_F|R_{12}|)\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$，带有额外的 DM 型相互作用项的伊辛模型 $H(\varepsilon_F)^{RKKY} = F_1(q_F|R_{12}|)[S_{1x}S_{2x}\pm(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2)_x]$ 以及各向异性海森堡模型 $H(\varepsilon_F)^{RKKY} = F_1(|R_{12}|)[S_{1x}S_{2x}-S_{1y}S_{2y}-S_{1z}S_{2z}]$。在长程各向异性海森堡模型中，沿着面内和垂直于面的方向，自旋关联总是相异的——要么是铁磁的，要么是反铁磁的。

表 2.2 中的参数条件，例如 $\theta = k\pi$ 可以在厚度为 10nm 的窄禁带半导体锑化铟（InSb）量子阱中用电场强度 $E\approx 50$ kV/cm 的条件实现（见附录 D）。在如 HgCdTe 量子阱那样的窄禁带半导体量子阱里，自旋轨道耦合效应一般是很强的，α 值从 10^{-13} eVm 到 10^{-10}eVm，具体数值取决于外加门电压、量子阱厚度和电子密度 [34]。选择合适的外加电场，我们可以实现在不同的自旋模型之间切换。

2.4　RKKY 相互作用与量子计算

我们可以利用海森堡形式或者伊辛形式的 RKKY 相互作用来实现全电控制的双量子比特门。自旋轨道耦合系统中相互作用对称性的可控性给了我们进一步实现各种不同的双量子比特门的可能，例如 $\sqrt{\text{SWAP}}$ 门和可控相位门。前述这两种双量子比特门中任意一种，附加上单自旋操纵，就可以构成普适量子计算的一组完全集。特别是各向同性海森堡相互作用能够被用来作为单量子比特门和双量子比特门 [35]，所以仅靠我们这里的 RKKY 相互作用就可以构造出普适量子计算方案。为了估计操作率，我们注意到交换耦合 J 可以用外加电场调节到 1meV，这表明如果在这个操作率下可以实现电控制则实现一个皮秒循环内的双量子比特门是可能的。

在一个真实的半导体低维结构体系中，自旋轨道耦合效应的影响是不可避

表 2.2: 各种量子自旋模型举例 ± 相应于 (001) 面上的量子线是沿着 [100] (+) 方向还是 [010] (−) 方向

晶面	自旋模型	$H(\varepsilon_F)^{RKKY}$	θ	φ
(001)	海森堡模型	$F_1\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$	$k\pi,(k\in\mathbb{Z})$	任意值
	各向异性海森堡模型	$F_1\left[S_{1x}S_{2x}-S_{1y}S_{2y}-S_{1z}S_{2z}\right]$	$\pi/2$	$\pi/2$
	带 DM 项伊辛模型	$F_1[S_{1x}S_{2x}\pm(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2)_x]$	$\pi/4$	$\pi/2$
(110)	海森堡模型	$F_1\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$	$k\pi,(k\in\mathbb{Z})$	任意值
	各向异性海森堡模型	$F_1\left[-S_{1x}S_{2x}-S_{1y}S_{2y}+S_{1z}S_{2z}\right]$	$\pi/2$	$\pi/2$
	带 DM 项伊辛模型	$F_1[S_{1z}S_{2z}+(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2)_z]$	$\pi/4$	$\pi/2$
(111)	海森堡模型	$F_1\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$	$k\pi,(k\in\mathbb{Z})$	0
	各向异性海森堡模型	$F_1\left[-S_{1x}S_{2x}+S_{1y}S_{2y}-S_{1z}S_{2z}\right]$	$\pi/2$	0
	带 DM 项伊辛模型	$F_1[S_{1y}S_{2y}+(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2)_y]$	$\pi/4$	0

免的。自旋轨道耦合效应会造成交换相互作用的各向异性，从而导致额外的自旋退相干。Bonesteel 等提出可以在量子门操作中用自旋间耦合的时间对称脉冲把自旋轨道耦合的一阶效应消除 [36]。随后，Burkard 等提出在量子点的交换耦合中通过对积分相互作用强度（integrated interaction strength）的调节（本质上是调节耦合的脉冲强度或脉冲时间），可以在量子计算的门序列中把自旋轨道耦合的效应完全抵消 [33]。

当我们考虑利用 RKKY 有效相互作用构造量子门时，我们必须考虑如何消除 Rashba 和 Dresselhaus 这两种自旋轨道耦合的影响，使各向异性的 RKKY 交换相互作用回到各向同性的海森堡形式。

我们调节 Rashba 旋轨耦合强度 α，使得 $\varphi=k\pi\,(k\in\mathbb{Z})$ ，从而

$$H(\varepsilon_F) = F_1\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2, \tag{2.11}$$

$$F_1(q_{F,}|R_{12}|) = \frac{4J^2}{\pi}\frac{m^*}{\hbar^2}\left[\mathrm{Si}(2q_F|R_{12}|)-\frac{\pi}{2}\right], \tag{2.12}$$

$$q_F = \sqrt{k_F^2+\left(\frac{k\pi}{|R_{12}|}\right)^2},(k\in\mathbb{Z}). \tag{2.13}$$

我们得到了一个海森堡型的交换相互作用，这里的自旋交换耦合与不考虑自旋轨道耦合时的 RKKY 相互作用相比唯一的区别仅在于载流子费米波矢形式上的不同，其中 k_F 是无自旋轨道耦合时载流子的费米波矢，$\frac{k\pi}{|R_{12}|}$ 表征有自旋轨

道耦合效应时载流子的费米波矢，其物理实质与 k_F 完全相同。这样我们就消除了自旋轨道耦合所造成 RKKY 有效相互作用的各向异性，从形式上回到了无自旋轨道耦合时的 RKKY 相互作用形式。由于 D. P. DiVincenzo 等提出了只需要交换相互作用就可以构建出通用量子门 [35]，包括单比特量子门和双比特量子门，因而我们利用这个海森堡型的 RKKY 交换相互作用就可以实现通用量子计算。

从前面我们知道，自旋轨道耦合效应会造成额外的自旋退相干，而自旋退相干会诱导量子计算的差错。这种差错是不可避免的，因而如何纠正这种差错就成为量子计算中的一个重要问题。目前人们提出了若干种思路：一种是构造所谓量子纠错码（QECCs）的方案 [37–41]，第二种是所谓动力学解耦和对称化方案 [42–45]，第三种是构建无退相干子空间或编码普适性的方案 [46–53]，第四种是所谓超相干量子比特或保相干的量子比特 [54, 55]。我们下面提出的方案，思路比较接近于超相干量子比特的方案。

我们把考虑自旋轨道耦合的 RKKY 相互作用形式对自旋单三态展开，得

$$
\begin{array}{cccc}
T_+ = & S = & T_0 = & T_- = \\
|\uparrow\uparrow\rangle & \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) & \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) & |\downarrow\downarrow\rangle
\end{array}
$$

$$
H_{1,2}^{RKKY} = \frac{\hbar^2}{4}
\begin{pmatrix}
\cos 2\varphi & \sqrt{2}\sin 2\varphi e^{-i\theta} & 0 & -e^{-i2\theta}(1-\cos 2\varphi) \\
\sqrt{2}\sin 2\varphi e^{i\theta} & -1-2\cos 2\varphi & 0 & \sqrt{2}\sin 2\varphi e^{-i\theta} \\
0 & 0 & 1 & 0 \\
-e^{i2\theta}(1-\cos 2\varphi) & \sqrt{2}\sin 2\varphi e^{i\theta} & 0 & \cos 2\varphi
\end{pmatrix}
\begin{matrix} T_+ \\ S \\ T_0 \\ T_- \end{matrix}
$$

我们注意到，其中的 T_0 态不受自旋轨道耦合的影响，始终是 RKKY 相互作用的本征态，因而在这个量子态上，自旋轨道耦合效应所诱导的自旋退相干消失。利用这一性质，我们就可以构建出一个在动力学演化过程中始终保持原有相干性的量子比特，类似于超相干量子比特。

从前面的讨论可知，我们利用 RKKY 相互作用时，并不是利用在任意参数下的 RKKY 相互作用，而是利用在特定参数下消除了各向异性之后的 RKKY 相互作用。这种情形下的 RKKY 相互作用在形式上与各向同性的海森堡形式相同。因而此时 RKKY 相互作用对自旋单三态展开的形式为

$$H_{1,2}^{RKKY} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{array}{c} \begin{matrix} T_+ & S & T_0 & T_- \end{matrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \begin{matrix} T_+ \\ S \\ T_0 \\ T_- \end{matrix}$$

，即自旋单三态均为此时 RKKY 相互作用的本征态。

如果发生了自旋轨道耦合效应的扰动，就将开启自旋退相干的演化。T_+, S, T_- 三个本征态混合，不再是 RKKY 相互作用的本征态，建筑在自旋单三态基础上的量子比特也将发生演化，从而导致差错。我们注意到 T_0 态在这一演化过程中始终保持不变，而 T_0 态又包含所有自旋向上和向下极化的信息，从而我们就可以通过对 T_0 态的分析，恢复出原有量子比特所含的信息。

Tang 等提出了可以在半导体结构中实现对单个离子自旋的全电控制 [3]，这一思想对我们的方案也有助益。我们的方案的优点就在于在量子计算的全过程中排除对磁场的需要，实现完全的电操纵。通过我们构建的海森堡型 RKKY 交换相互作用就已经可以实现通用量子计算，另外我们还可以借助 Tang 等的方案，实现单量子比特的电操控，再联合 RKKY 相互作用提供的双量子比特门，即可实现通用量子计算的经典方案 [56]。

2.5 短程 RKKY 相互作用与其他

上述构建电控自旋自旋相互作用的方法可以被推广到更加复杂的结构。这里我们提出在半导体异质结的量子线上用一列局域自旋（即自旋链或自旋格点）替换一对自旋比特。这种自旋格点可以被用来作为多体物理的演示平台，也可以被作为如量子相变等各种量子现象的演示平台，或者有可能作为一种计算资源对凝聚态物理系统进行量子模拟。然而，我们可以从 RKKY 相互作用的渐近形式 $\lim_{R_{12}\to\infty} F_1(q_F R_{12}) \to \cos(2q_F R_{12})/R_{12}$ 看到，其渐近形式与距离 R_{12} 的一次方成反比，还附加一个振荡因子。这表明 RKKY 相互作用是一个长程相互作用。实际上，为了实现这里提出的人工自旋格点，我们需要对自旋做精确地放置，这在技术上依然是一个巨大的挑战。长程相互作用会使得系统的量子物理更丰富也更复杂，这样的系统经常会显现出由诸如外电场和杂质浓度等参数决定的量子相变，从而使系统的复杂性大大增加了。为了避免这种复杂性，实现之前提到的量子平台，我们需要一种短程的自旋自旋相互作

用。我们可以利用一维窄禁带半导体量子线来实现这种短程自旋自旋相互作用。在一维窄禁带半导体中，作为局域自旋媒介的巡游电子在价带和导带之间是虚激发，从而使 RKKY 相互作用由长程振荡衰减行为转变为短程指数衰减行为。自旋自旋相互作用的程函数从公式 (2.1a) 变为 $F_1(q_F R) \propto e^{-\lambda R}$。其中相互作用长度 $\lambda \approx \hbar/\sqrt{2m^*\Delta}$ 主要由考虑大质量空穴情况下的电子有效质量来决定，其数值可以通过改变带隙来调节，例如，调节碲镉汞（HgCdTe）量子阱的带隙宽度从 0.1 eV 到零（其间经历了量子相变）[57]，相应相互作用长度从 10 nm 变为无穷大。这提供了一种新的途径来控制自旋自旋相互作用的程函数 [58]。使用虚激发来中介自旋自旋相互作用也在很大程度上避免了快速的光学退相干 [15, 16]。在自旋格点中，人们可以控制自旋自旋相互作用的实空间维度并实现各种不同的自旋模型的电控制，例如各向异性海森堡模型、带额外 DM 项的伊辛模型等。DM 型能够在自旋链中诱导出有趣的螺旋相，其中自旋沿着 $\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}$ 轴旋转。使用由自旋轨道耦合效应导致的扭曲 DM 项，人们可以利用一个沿着自旋链传播的电场脉冲产生沿着自旋链传播的自旋波。这种自旋波实质上是一种低功耗的自旋流，原因是人们只需要翻转相邻自旋而不需要推动电子漂移。

然而，半导体低维电子气中的自旋轨道耦合效应是一把双刃剑。一方面在这类系统中，典型的自旋驰豫过程是 D'yakonov-Perel' (DP) 机制 [59]，这种自旋驰豫会被自旋轨道耦合所增强。但另一方面，由于 k 空间中只有单个点满足真实激发的动量和能量守恒，所以量子线的准一维结构上的自旋格点中由自旋轨道耦合引起的自旋退相干被强烈压制了。究竟哪种机制起主导作用，还有待未来的研究澄清。

2.6　本章小结

本章提出了局域在量子线上的电子，由于其 Rashba 自旋轨道耦合和 Dresselhaus 自旋轨道耦合的存在，使我们能够实现对自旋自旋相互作用的全电操控。我们既可以通过调节系统的费米能来调节 RKKY 相互作用的强度，也能通过调节自旋轨道耦合的强度与选择合适的晶面有力地实现 RKKY 相互作用的对称性调控，从而实现各种类型的自旋自旋相互作用。我们可以实现各向同性和各向异性的海森堡模型、带额外 DM 项的伊辛模型。RKKY 相互作用中由自旋轨道耦合引起的各向异性和扭曲项可以通过改变自旋轨道耦合的强

度来消除。与构建自旋模型相关的参数都可以被电场控制。这样一种可控性可以被用来观测无外磁场的自旋格点中的量子相变。在窄禁带半导体中我们可以利用带间虚激发实现短程自旋自旋相互作用。

参考文献

[1] B. E. Kane, A silicon-based nuclear spin quantum computer, Nature (London) **393**, 133 (1998).

[2] D. Chiba, M. Yamanouchi, F. Matsukura, H. Ohno, Electrical Manipulation of Magnetization Reversal in a Ferromagnetic Semiconductor, Science **301**, 943 (2003).

[3] Jian-Ming Tang, Jeremy Levy, and Michael E. Flatte, All-Electrical Control of Single Ion Spins in a Semiconductor, Phys. Rev. Lett. **97**, 106803 (2006).

[4] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells, Science **318**, 766 (2007).

[5] Alexandr Chernyshov, Mason Overby, Xinyu Liu, Jacek K. Furdyna, Yuli Lyanda-Geller and Leonid P. Rokhinson, Evidence for reversible control of magnetization in a ferromagnetic material by means of spin – orbit magnetic field, Nat. Phys. **5**, 656 (2009).

[6] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2000).

[7] B. Ruggiero, P. Delsing, C. Granata, Y. A. Pashkin, P. Silvestrini(Eds.), *Quantum Computing in Solid State Systems* (Springer, New York, 2006).

[8] D. D. Awschalom, D. Loss, N. Samarth(Eds.), *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation* (Springer, New York, 2002).

[9] D. Loss and D. P. DiVincenzo, Quantum computation with quantum dots, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).

[10] Guido Burkard, Daniel Loss, David P. DiVincenzo, Coupled quantum dots as quantum gates, Phys. Rev. B **59**, 2070 (1999).

[11] X. Hu and S. Das Sarma, Hilbert-space structure of a solid-state quantum computer: Two-electron states of a double-quantum-dot artificial molecule, Phys. Rev. A **61**, 062301 (2000).

[12] J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor, E. A. Laird, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, A. C. Gossard, Coherent Manipulation of Coupled Electron Spins in Semiconductor Quantum Dots, Science **309**, 2180 (2005).

[13] A. Imamoglu, D. D. Awschalom, G. Burkard, D. P. DiVincenzo, D. Loss, M. Sherwin, and A. Small, Quantum Information Processing Using Quantum Dot Spins and Cavity QED, Phys. Rev. Lett. **83**, 4204 (1999).

[14] G. Burkard and A. Imamoglu, Ultra-long-distance interaction between spin qubits, Phys. Rev. B **74**, 041307(R) (2006).

[15] C. Piermarocchi, Pochung Chen, and L. J. Sham, Optical RKKY Interaction between Charged Semiconductor Quantum Dots, Phys. Rev. Lett. **89**, 167402 (2002).

[16] J. Fernández-Rossier, C. Piermarocchi, P. Chen, A. H. MacDonald, and L. J. Sham, Coherently Photoinduced Ferromagnetism in Diluted Magnetic Semiconductors, Phys. Rev. Lett. **93**, 127201 (2004).

[17] G. F. Quinteiro, J. Fernández-Rossier, and C. Piermarocchi, Long-Range Spin-Qubit Interaction Mediated by Microcavity Polaritons, Phys. Rev. Lett. **97**, 097401 (2006).

[18] N. J. Craig, J. M. Taylor, E. A. Lester, C. M. Marcus, M. P. Hanson, A. C. Gossard, Tunable Nonlocal Spin Control in a Coupled – Quantum Dot System, Science **304**, 565 (2004).

[19] Hiroshi Imamura, Patrick Bruno and Yasuhiro Utsumi, Twisted exchange interaction between localized spins embedded in a one- or two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit coupling, Phys. Rev. B **69**, 121303(R) (2004).

[20] C. H. Ziener, S. Glutsch, and F. Bechstedt, RKKY interaction in semiconductors: Effects of magnetic field and screening, Phys. Rev. B **70**, 075205 (2004).

[21] L G Ferreira Filhoy, I C da Cunha Limayz and A Troper, Indirect exchange between magnetic impurities via the inhomogeneous electron gas in a $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ symmetric double quantum well under a longitudinal electric field, Semicond. Sci. Technol. **12**, 1592 (1997).

[22] James A. Nesteroff, Yuriy V. Pershin, and Vladimir Privman, Polarization of Nuclear Spins from the Conductance of QuantumWire, Phys. Rev. Lett. **93**, 126601 (2004).

[23] Go Yusa, Koji Muraki, Kei Takashina, Katsushi Hashimoto, Yoshiro Hirayama1, Controlled multiple quantum coherences of nuclear spins in a nanometre-scale device, Nature (London) **434**, 1001 (2005).

[24] Gonzalo Usaj, P. Lustemberg, and C. A. Balseiro, Tuning the Nonlocal Spin-Spin Interaction between Quantum Dots with a Magnetic Field, Phys. Rev. Lett. **94**, 036803 (2005).

[25] Fanyao Qu and Pawel Hawrylak, Theory of Electron Mediated Mn-Mn Interactions in Quantum Dots, Phys. Rev. Lett. **96**, 157201 (2006).

[26] J. Simonin, Kondo Quantum Dots and the Novel Kondo-Doublet Interaction, Phys. Rev. Lett. 97, 266804 (2006).

[27] Lorenz Meier, Gian Salis, Ivan Shorubalko, Emilio Gini, Silke Schön, and Klaus Ensslin, Measurement of Rashba and Dresselhaus spin – orbit magnetic fields, Nat. Phys. **3**, 650 (2007).

[28] Matthias Scheid, Makoto Kohda, Yoji Kunihashi, Klaus Richter, and Junsaku Nitta, All-Electrical Detection of the Relative Strength of Rashba and Dresselhaus Spin-Orbit Interaction in Quantum Wires, Phys. Rev. Lett. **101**, 266401 (2008).

[29] Y. Rikitake and H. Imamura, Decoherence of localized spins interacting via RKKY interaction, Phys. Rev. B **72**, 033308 (2005).

[30] N. F. Schwabe, R. J. Elliott, Ned S. Wingreen, Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida interaction across a tunneling junction out of equilibrium, Phys. Rev. B **54**, 12953 (1996).

[31] Y. Yafet, Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida range function of a one-dimensional free-electron gas, Phys. Rev. B **36**, 3948 (1987).

[32] D. N. Aristov, Indirect RKKY interaction in any dimensionality, Phys. Rev. B **55**, 8064 (1997).

[33] Guido Burkard and Daniel Loss, Cancellation of Spin-Orbit Effects in Quantum Gates Based on the Exchange Coupling in Quantum Dots, Phys. Rev. Lett. **88**, 047903 (2002).

[34] W. Yang and K. Chang, Nonlinear Rashba model and spin relaxation in quantum wells, Phys. Rev. B **74**, 193314 (2006).

[35] D. P. DiVincenzo, D. Bacon, J. Kempe, G. Burkard, K. B. Whaley, Universal quantum computation with the exchange interaction, Nature (London) **408**, 339 (2000).

[36] N. E. Bonesteel, D. Stepanenko, D. P. DiVincenzo, Anisotropic Spin Exchange in Pulsed Quantum Gates, Phys. Rev. Lett. **87**, 207901 (2002).

[37] Peter W. Shor, Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory, Phys. Rev. A **52**, (R)2493 (1995).

[38] A. M. Steane, Error Correcting Codes in Quantum Theory, Phys. Rev. Lett. **77**, 793 (1996).

[39] Daniel Gottesman, Class of quantum error-correcting codes saturating the quantum Hamming bound, Phys. Rev. A **54**, 1862 (1996).

[40] Emanuel Knill and Raymond Laflamme, Theory of quantum error-correcting codes, Phys. Rev. A **55**, 900 (1997).

[41] Emanuel Knill, Raymond Laflamme and Lorenza Viola, Theory of Quantum Error Correction for General Noise, Phys. Rev. Lett. **84**, 2525 (2000).

[42] Lorenza Viola and Seth Lloyd, Dynamical suppression of decoherence in two-state quantum systems, Phys. Rev. A **58**, 2733 (1998).

[43] Lorenza Viola, Emanuel Knill and Seth Lloyd, Dynamical Decoupling of Open Quantum Systems, Phys. Rev. Lett. **82**, 2417 (1999).

[44] Paolo Zanardi, Symmetrizing evolutions, Physics Letters A **258**, 77 (1999).

[45] Lorenza Viola, Emanuel Knill and Seth Lloyd, Dynamical Generation of Noiseless Quantum Subsystems, Phys. Rev. Lett. **85**, 3520 (2000).

[46] D. A. Lidar, I. L. Chuang and K. B. Whaley, Decoherence-Free Subspaces for Quantum Computation, Phys. Rev. Lett. **81**, 2594 (1998).

[47] D. Bacon, J. Kempe, D. A. Lidar and K. B. Whaley, Universal Fault-Tolerant Quantum Computation on Decoherence-Free Subspaces, Phys. Rev. Lett. **85**, 1758 (2000).

[48] D. Kielpinski, V. Meyer, M. A. Rowe, C. A. Sackett, W. M. Itano, C. Monroe, D. J. Wineland, A Decoherence-Free Quantum Memory Using Trapped Ions, Science **291**, 1013 (2001).

[49] Daniel A. Lidar, Dave Bacon, Julia Kempe and K. B. Whaley, Decoherence-free subspaces for multiple-qubit errors. I. Characterization, Phys. Rev. A **63**, 022306 (2001).

[50] Daniel A. Lidar, Dave Bacon, Julia Kempe and K. B. Whaley, Decoherence-free subspaces for multiple-qubit errors. II. Universal, fault-tolerant quantum computation, Phys. Rev. A **63**, 022307 (2001).

[51] J. Kempe, D. Bacon, D. A. Lidar and K. B. Whaley, Theory of decoherence-free fault-tolerant universal quantum computation, Phys. Rev. A **63**, 042307 (2001).

[52] D. A. Lidar and L.-A. Wu, Reducing Constraints on Quantum Computer Design by Encoded Selective Recoupling, Phys. Rev. Lett. **88**, 017905 (2001).

[53] L.-A.Wu and D. A. Lidar, Dressed Qubits, Phys. Rev. Lett. **91**, 097904 (2003).

[54] Dave Bacon, Kenneth R. Brown and K. Birgitta Whaley, Coherence-Preserving Quantum Bits, Phys. Rev. Lett. **87**, 247902 (2001).

[55] Yaakov S. Weinstein1 and C. Stephen Hellberg, Scalable Architecture for Coherence-Preserving Qubits, Phys. Rev. Lett. **98**, 110501 (2007).

[56] Adriano Barenco, Charles H. Bennett, Richard Cleve, David P. DiVincenzo, Norman Margolus, Peter Shor, Tycho Sleator, John A. Smolin, Harald Weinfurter, Elementary gates for quantum computation, Phys. Rev. A **52**, 3457 (1995).

[57] Wen Yang, Kai Chang, Shou-Cheng Zhang, Intrinsic Spin Hall Effect Induced by Quantum Phase Transition in HgCdTe QuantumWells, Phys. Rev. Lett. **100**, 056602 (2008).

[58] N. Bloembergen and T. J. Rowland, Nuclear Spin Exchange in Solids: Tl^{203} and Tl^{205} Magnetic Resonance in Thallium and Thallic Oxide, Phys. Rev. **97**, 1679 (1955).

[59] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, Sov. Phys. Solid State 13, 3023 (1972) (Fiz. Tverd. Tela (Leningrad) 13, 3581 (1971)).

第三章　拓扑绝缘体表面上的电控表面磁性

3.1　引言

对半导体中电子和磁离子的自旋自由度作全电量子操控是自旋电子学和量子信息处理领域的中心课题之一。固体中的自旋轨道耦合效应是一种本征的相对论效应并且可以被外加电场调控，例如破坏空间反演对称性等（前一章对此已经作了细致的研究）。最近的发现表明自旋轨道耦合可以反转导带和价带的位置，从而在一系列材料中导致一种被称作拓扑绝缘体的新的物质态，例如二维碲化汞（HgTe）量子阱 [1–3]、三维铋锑合金（Bi_xSb_{1-x}）[4, 5] 以及三维硒化铋（Bi_2Se_3）或碲化铋（Bi_2Te_3）材料 [6–8]。这些拓扑绝缘体拥有一个绝缘性的体结构和金属性的边缘态或表面态，这里的边缘态或表面态是由时间反演对称性所保护的。表面态的能谱在布里渊区的 Γ 点是一个无质量的狄拉克圆锥，这个特征已经被角分辨光电子谱（ARPES）的实验证实了 [5, 8, 9]。最新的报道表明人们可以通过改变背门电压电调控三维拓扑绝缘体材料的费米面 [10]。尽管三维拓扑绝缘体表面态的能谱与石墨烯非常相似，但是它们之间仍然有一些重要的区别。石墨烯的螺旋性不是定义在电子的真实自旋上，而是定义在石墨烯的两个不等价子格点上。与之相反，拓扑绝缘体表面态的螺旋性则定义在电子的真实自旋上。这种螺旋性表面态是自旋动量锁定的，因而很自然的会导致一系列的自旋相关效应，例如自旋过滤、巨磁阻效应和 RKKY 相互作用 [11–13]。

长程 RKKY 型的自旋自旋相互作用在磁性金属和稀磁半导体中扮演着重要的角色。我们可以预料，三维拓扑绝缘体表面态上的媒介螺旋性电子必然导致 RKKY 相互作用拥有一些不寻常的性质。值得注意的是，在三维拓扑绝缘体中引入大量的磁杂质会破坏时间反演对称性并在表面态的狄拉克能谱中打开一个能隙 [14]。这种转变使得无质量的狄拉克电子变为有质量的狄拉克电子并且改变狄拉克点附近表面态的自旋取向。巡游电子态的特性（例如螺旋性和能量色散关系）决定着磁杂质之间的自旋自旋相互作用，然而，磁杂质的反作用同样影响着巡游电子态，比如说打开能隙的效应，而巡游电子态的这种改变又会迭代影响自旋自旋相互作用。

最近的实验表明三维拓扑绝缘体（Bi_2Se_3 和 Bi_2Te_3）表面态的能谱有很强的弯曲效应 [8, 9, 15]。这种弯曲效应在费米能比较大的时候会变得更为重要，并且一定会影响三维拓扑绝缘体的表面磁性。

在接下来的几节里，我们把注意力集中于三维拓扑绝缘体的表面磁性，及其背后的磁相互作用机制——以螺旋性无质量或有质量狄拉克电子为媒介的 RKKY 相互作用。从 RKKY 相互作用的解析表达式出发，我们研究通过改变外加门电压来实现各种不不同的量子自旋模型，如 Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 模型、XXZ 模型和 XZ 模型。磁杂质引起的带隙打开将在 RKKY 相互作用中导致一个额外的伊辛项并且可以在费米能处于带隙中时使 RKKY 相互作用转变为短程关联，即 Bloembergen-Rowland (BR) 相互作用。弯曲效应等价于一个各向异性的垂直于表面的动量依赖有效磁场，会导致一个晶向依赖的 RKKY 相互作用。我们可以利用扫描隧道显微镜（STM）、钉扎效应或库仑相互作用在三角或正方等各种格点下放置局域自旋。RKKY 相互作用的独特性质与自旋格点的几何结构的相互作用会引致自旋系统基态丰富的自旋构形，诸如铁磁相、反铁磁相和三维拓扑绝缘体表面的自旋阻挫。

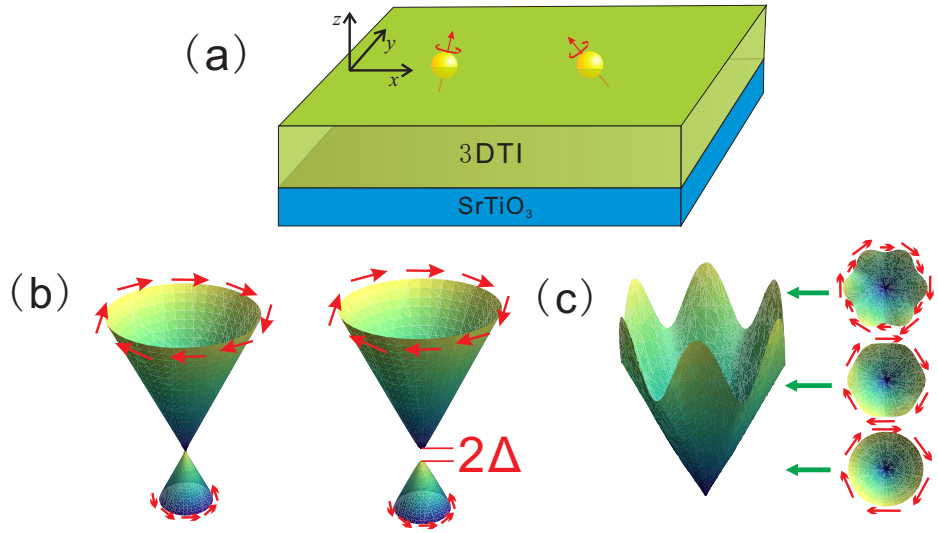

图 3.1: (a) 三维拓扑绝缘体表面两局域自旋及其电控 RKKY 相互作用的示意图。图中三维拓扑绝缘体薄膜外延生长在钛酸锶（$SrTiO_3$）基底上 [10]。(b) 无质量和有质量表面态与其自旋取向。2Δ 代表时间反演对称性破缺造成的能隙。(c)Bi_2X_3 族拓扑绝缘体的弯曲效应及等能面上的自旋取向。

3.2　拓扑绝缘体表面态与 RKKY 相互作用

首先，我们考虑放置在三维拓扑绝缘体表面的 $\mathbf{R}_i$ $(i=1,2)$ 处的两磁杂质 $\mathbf{S}_i$，其间以无质量的狄拉克电子为媒介（见图 3.1(a)）。系统的哈密顿量为 $H=H_0+H_i^{int}$，其中 $H_0=\hbar v_F\left(k_x\sigma_y-k_y\sigma_x\right)+\frac{\lambda}{2}\left(k_+^3+k_-^3\right)\sigma_z$ 是无质量狄拉克电子的哈密顿量 [16]，$H_i^{int}=-J\left(\overrightarrow{\sigma}\cdot\mathbf{S}\right)\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i\right)$ 是磁杂质和电子之间的 s-d 相互作用。$\mathbf{k}$ 是电子的面内动量，$\overrightarrow{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ 代表电子真实自旋的泡利矩阵。v_F 是表面态的费米速度，在 Bi_2Se_3[6] 中为 $6.2\times10^5\mathrm{ms}^{-1}$，在 Bi_2Te_3 [16] 中为 $3.9\times10^5\mathrm{ms}^{-1}$。$\widehat{z}$ 是垂直于表面的单位矢量。λ 是六角弯曲项的系数。J 表示 s-d 交换相互作用的强度，大约为 $2\backsim13$ eV$\mathring{\mathrm{A}}^2$ [11]。

我们先忽略弯曲效应，则可得实空间的格林函数

$$G_\varepsilon\left(\pm\mathbf{R}\right)=-\frac{\varepsilon}{4\hbar^2v_F^2}\left[iH_0^{(1)}\left(\frac{R\varepsilon}{\hbar v_F}\right)\mp\widehat{z}\cdot\left(\overrightarrow{\sigma}\times\mathbf{n}_R\right)H_1^{(1)}\left(\frac{R\varepsilon}{\hbar v_F}\right)\right]\tag{3.1}$$

。其中 $H_\nu^{(1)}(x)$ 是第 ν 阶第一类汉克尔函数，$\mathbf{R}\equiv R\mathbf{n}_R$。在圈图近似下，我们得到两磁杂质间的 RKKY 相互作用为

$$H_{1,2}^{RKKY}=\frac{2}{\pi}\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\varepsilon_F}\mathrm{d}\varepsilon\mathrm{Tr}[H_1^{int}G_\varepsilon\left(\mathbf{R};\varepsilon+i0^+\right)H_2^{int}G_\varepsilon\left(-\mathbf{R};\varepsilon+i0^+\right)]\tag{3.2}$$

，其中 ε_F 是费米能，Tr 表示对巡游狄拉克电子的自旋自由度部分求迹。然后 RKKY 相互作用可以写成

$$\begin{aligned}H_{1,2}^{RKKY}&=F_1\left(R,\varepsilon_F\right)\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2+F_2\left(R,\varepsilon_F\right)\left(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2\right)_y\\&\quad+F_3\left(R,\varepsilon_F\right)S_1^yS_2^y,\end{aligned}\tag{3.3}$$

其中程函数为

$$\begin{aligned}F_1\left(R,\varepsilon_F\right)&=-\frac{J^2}{4\pi^{\frac{3}{2}}\hbar v_FR^3}[G_{2,4}^{2,1}\left(\frac{R^2\varepsilon_F^2}{\hbar^2v_F^2}\middle|\begin{matrix}1,2\\\frac{3}{2},\frac{5}{2},0,\frac{1}{2}\end{matrix}\right)\\&\quad-G_{2,4}^{2,1}\left(\frac{R^2\varepsilon_F^2}{\hbar^2v_F^2}\middle|\begin{matrix}1,2\\\frac{3}{2},\frac{3}{2},0,\frac{3}{2}\end{matrix}\right)+\frac{\sqrt{\pi}}{2}],\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}F_2\left(R,\varepsilon_F\right)&=-\frac{J^2}{4\pi^{\frac{3}{2}}\hbar v_FR^3}[G_{2,4}^{2,1}\left(\frac{R^2\varepsilon_F^2}{\hbar^2v_F^2}\middle|\begin{matrix}2,\frac{3}{2}\\2,2,0,1\end{matrix}\right)\\&\quad-G_{1,3}^{2,0}\left(\frac{R^2\varepsilon_F^2}{\hbar^2v_F^2}\middle|\begin{matrix}\frac{3}{2}\\1,2,0\end{matrix}\right)],\end{aligned}$$

$$F_3\left(R,\varepsilon_F\right)=-\frac{J^2}{2\pi^{\frac{3}{2}}\hbar v_F R^3}[G_{2,4}^{2,1}\left(\frac{R^2\varepsilon_F^2}{\hbar^2 v_F^2}\middle|\begin{matrix}1,2\\ \frac{3}{2},\frac{3}{2},0,\frac{3}{2}\end{matrix}\right)-\frac{3\sqrt{\pi}}{8}].$$

这里 $G_{p,q}^{m,n}$ 是梅杰（Meijer's）G 函数 [17]。RKKY 相互作用包含三项：海森堡项、DM 项和伊辛项，各有不同的程函数。由于这三项之间的竞争关系，我们可以方便地实现各种自旋模型。

这三种程函数都随 R 的增加而振荡衰减，这一行为意味着 RKKY 相互作用是两自旋间长程关联（见图 3.2(a)）。利用汉克尔函数的渐近形式，RKKY 相互作用的长程渐近行为（即 $k_F R\gg 1$）可以表达为

$$\begin{aligned}H_{1,2}^{RKKY(asym)}\approx\ & \frac{J^2\varepsilon_F}{2\pi^2\hbar^2 v_F^2 R^2}[\sin\left(\frac{2R\varepsilon_F}{\hbar v_F}\right)\left(\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2-S_1^y S_2^y\right)\\ &-\cos\left(\frac{2R\varepsilon_F}{\hbar v_F}\right)\left(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2\right)_y].\end{aligned}\tag{3.4}$$

从公式 (3.4) 中我们可以清楚地看到 n- 型拓扑绝缘体 ($\varepsilon_F>0$) 中 RKKY 相互作用的振荡行为, 在大 $\varepsilon_F R$ 时这种振荡行为占据主导地位。海森堡项和伊辛项的长程行为的空间依赖关系为与 $1/R^2$ 成正比，这与常规二维电子气是一致的，但与石墨烯的 $1/R^3$ 的依赖关系不同。有趣的是，我们可以看到海森堡项和伊辛项有着几乎完全相同的系数但是正好反号。这意味着伊辛项总是与海森堡项的 z 成分抵消。通过扫描隧道显微镜技术选取合适的距离 R 或者通过背门电压调节费米能 ε_F（见图 3.2(b)），人们甚至可以完全消除海森堡项和伊辛项，从而得到只包含 DM 相互作用的 RKKY 相互作用：

$$H_{1,2}^{RKKY}\left(R,\varepsilon_F^c\right)\simeq F_2\left(R,\varepsilon_F^c\right)\left(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2\right)_y\tag{3.5}$$

，即纯 DM 型自旋模型。这种 DM 相互作用的长程渐近行为也随 $1/R^2$ 衰减，但是和其他两项相比有一个 $\pm\pi/2$ 的相移。设定 $\varepsilon_F=0$，即本征三维拓扑绝缘体的情形，DM 项消失，RKKY 相互作用可以被简单写成

$$H_{1,2}^{RKKY}=\frac{J^2}{16\pi\hbar v_F R^3}\left(2S_1^x S_2^x+2S_1^z S_2^z-S_1^y S_2^y\right)\tag{3.6}$$

，即 XXZ 型自旋模型。注意这时程函数与石墨烯相同，随 $1/R^3$ 单调递减（见图 3.2(a) 中的插图）。

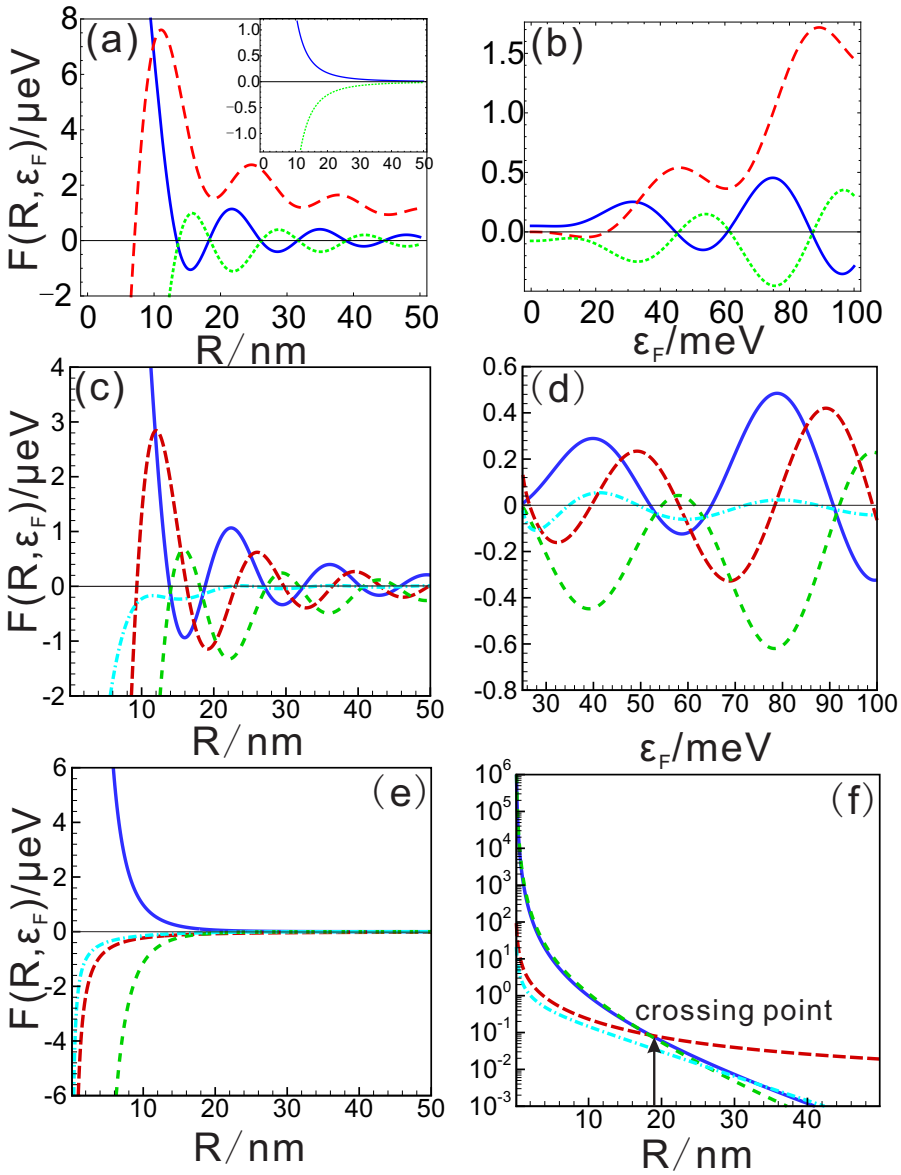

图 3.2: RKKY 相互作用的程函数随局域自旋间距 R(a,c) 或费米能 ε_F(b,d) 的变化。插图描述的是本征情形 ($\varepsilon_F = 0$)。图 (a),(b) 描述的是无质量狄拉克电子中介的 RKKY 相互作用，图 (c),(d) 描述的是有质量狄拉克电子 ($\Delta = 25$ meV)[14] 中介的 RKKY 相互作用。图 (e) 是 BR 相互作用的程函数，图 (f) 是 BR 程函数绝对值的对数坐标表示。蓝（实）线表示程函数 $F_1(R, \varepsilon_F)$，红（长虚）线表示程函数 $F_2(R, \varepsilon_F)$，绿（短虚）线表示程函数 $F_3(R, \varepsilon_F)$，青（点划）线表示程函数 $F_4(R, \varepsilon_F)$。我们在图 (a,c) 中选择参数 $\varepsilon_F = 100$ meV，在图 (b,d) 中选择参数 $R = 30$ nm，在图 (e,f) 中选择参数 $\varepsilon_F = -18$ meV。图 (c)-(f) 中能量的零点取在时间反演对称性打开的能隙中央。

3.3 能隙打开、弯曲效应与 RKKY 相互作用

接下来我们研究拓扑绝缘体中磁杂质导致的能隙打开效应。这时的表面态可以用一个有质量狄拉克电子哈密顿量来描述

$$H_0^{(gap)} = \hbar v_F \left(k_x \sigma_y - k_y \sigma_x\right) + \Delta \sigma_z \tag{3.7}$$

，其中 2Δ 是时间反演对称性破缺导致的能隙（见图 3.1(b)）。这个哈密顿量暗示磁杂质的影响类似于打开狄拉克点简并能级的塞曼项。类似地，我们得到考虑能隙打开效应的 RKKY 相互作用，

$$\begin{aligned} H_{1,2}^{RKKY(gap)} &= F_1^g\left(R,\varepsilon_F\right)\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2 + F_2^g\left(R,\varepsilon_F\right)\left(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2\right)_y \\ &\quad + F_3^g\left(R,\varepsilon_F\right)S_1^y S_2^y + F_4^g\left(R,\varepsilon_F\right)S_1^z S_2^z. \end{aligned} \tag{3.8}$$

当费米能位于导带中 ($\varepsilon_F > \Delta$) 时，有带隙情形的 RKKY 相互作用（公式 (3.8)）与无带隙情形的 RKKY 相互作用（公式 (3.3)）相比，有两个主要的区别（见图 3.2(c,d)）。第一个区别是有带隙时 DM 项的程函数有可能是负的。我们仍然能够通过选取合适的费米能 ε_F^c 和/或相邻自旋间距，实现纯 DM 模型。第二个区别是能隙打开效应会诱导出一个额外的沿垂直于面的 z 轴方向的伊辛项，这个伊辛项的系数比其他项的系数都要小。第二个区别表明能隙打开效应与产生塞曼型劈裂 $\Delta\sigma_z$ 的垂直磁场是相似的。

当我们把费米能调节至能隙以内时，RKKY 相互作用就会变成短程相互作用，即 BR 相互作用 [18]。图 3.2(e) 和 (f) 显示由有质量狄拉克电子为媒介的 BR 相互作用同样包含所有的四项。这是因为等能面上的自旋取向在远离狄拉克点附近时并不受能隙打开的影响。不过，其程函数与 RKKY 相互作用的程函数是完全不同的。从图 3.2(e) 中我们能看到海森堡项总是铁磁的，而两个伊辛项则总是反铁磁的。图 3.2(f) 描绘了 BR 相互作用在实空间的指数衰减行为。海森堡项 $F_1^g\left(R,\varepsilon_F\right)$ 和伊辛项 $F_3^g\left(R,\varepsilon_F\right)$ 有着几乎完全相同的幅度，在两磁杂质间的距离处于交错点 $R \simeq 19$ nm 以内时占据主导地位，这意味着我们能够在拓扑绝缘体表面上的格点实现 XZ 模型

$$H_{1,2}^{BR} \simeq F_1^g\left(R,\varepsilon_F\right)\left(S_1^x S_2^x + S_1^z S_2^z\right) \tag{3.9}$$

当磁杂质间距离处于交错点之外时，DM 项处于主导地位，但是其值非常小。

表 3.1: 由弯曲效应引起的晶向依赖的 RKKY 相互作用。角度 θ 定义为与 [110] 方向的夹角。

晶向	$H_{1,2}^{RKKY}$
[110]	$F_1^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2+F_2^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2)_y+F_3^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,S_1^yS_2^y$ $+F_4^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,S_1^zS_2^z$
$[\bar{1}10]$	$F_1^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2+F_2^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2)_y+F_3^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,S_1^yS_2^y$
[010]	$F_1^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2+F_2^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2)_z+F_3^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,S_1^yS_2^y$ $+F_4^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,S_1^zS_2^z+F_5^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,S_1^xS_2^x+F_6^w(R,\theta,\varepsilon_F)\,(S_1^xS_2^y+S_1^yS_2^x)$

随着费米能的增加，表面态能量色散关系的弯曲效应变得重要起来，导致了六角形的等能面（见图 3.1(c)）。弯曲效应的效果等同于破坏旋转对称性的各向异性有效垂直磁场，与能隙打开效应不同。这种各向异性必然导致一个各向异性的（即晶向依赖的）RKKY 相互作用。我们考虑沿不同晶向的局域自旋，可以得到沿不同晶向的 RKKY 相互作用表达式（见表 3.1）。这些公式表明各向异性的有效磁场会导致更为复杂的自旋模型。

3.4　自旋构形与反常霍尔效应

这一节我们转而讨论三维拓扑绝缘体表面上二维自旋系统的基态的各种可能的自旋构形。海森堡相互作用、DM 相互作用和伊辛相互作用的联合使得三维拓扑绝缘体表面态成为研究各种自旋构形的良好平台。首先我们考虑可以通过调节费米能或相邻自旋间距得到的纯 DM 模型。DM 相互作用扭转相邻自旋的自旋取向，并且导致一个非共面的自旋相或手征自旋相，比如说 DM 相互作用使得自旋取向发生倾斜从而不在面内并形成具有净铁磁矩的伞状自旋结构（见图 3.3）。当手征电子在非共面的自旋格点上跳跃时，它们会得到一个复杂的相因子（贝里相），如果这些相因子无法互相抵消，那么就会造成一个内生磁场，从而我们有可能在这个结构中实现反常霍尔效应。因此自旋手征性和净铁磁矩的存在可以在三维拓扑绝缘体表面态上诱致一个反常霍尔效应 [19, 20]。在正方自旋格点中，纯 DM 相互作用会导致一个垂直的最近邻自旋序。如果与海森堡相互作用联合作用，则正方格点中的自旋序如图 3.3(a) 中所示成为非共面的。对于三角自旋格点，DM 项和伊辛项能够诱导出自旋阻挫并将自旋指向面外从而构成手性自旋态，如图 4.3(b) 所示。我们可以定义自旋手征度

$\mathbf{S}_1 \cdot (\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3)$ 来描述每个三角形的铁磁矩，由于贝里相正比于自旋手征度并且可能不会被互相抵消 [20]，所以反常霍尔效应也可以在这类结构中发生。在笼目（Kagome）格点反铁磁体中，热力学测量和中子散射实验发现了手征自旋构形和 DM 相互作用诱导的净铁磁性 [21]。三维拓扑绝缘体表面上的反常霍尔效应能够通过测量横向霍尔电导率来证实。

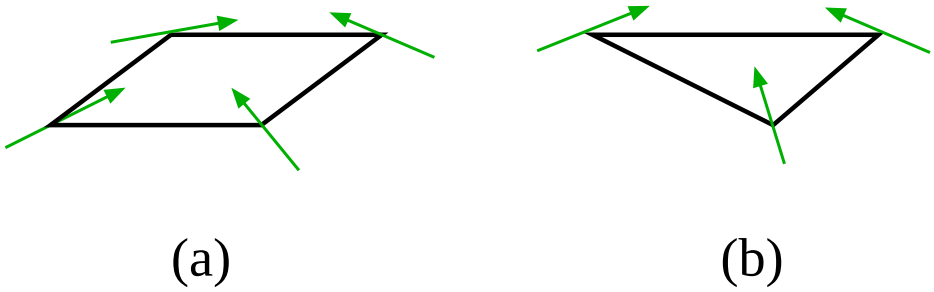

图 3.3: DM 相互作用和海森堡相互作用下正方和三角格点中自旋系统的手征自旋构形示意图。

当海森堡相互作用占主导地位时，自旋构形一般是共线或者共面的，没有自旋手征性。这种情况下不能存在反常霍尔效应，正方自旋格点会有长程共线铁磁基态，三角自旋格点中可能会有长程共面态，就像众所周知的 120° 长程序那样。由于自旋阻挫的存在，三角自旋格点的基态是高度简并的而且没有长程序。引入 DM 相互作用和反铁磁伊辛相互作用会部分或全部消除系统的简并度。如果合适地改变参数，这些自旋系统甚至可以转变为自旋玻璃相。这意味着人们可以利用扫描隧道显微镜技术在三维拓扑绝缘体表面态构建人造自旋阻挫系统。

中子散射将会是探测三维拓扑绝缘体表面和体自旋结构的有力工具。为了增强来自表面磁性的中子散射信号，我们可以采用大角度中子散射技术并将三维拓扑绝缘体平行堆叠起来。

3.5 三维拓扑绝缘体表面的自旋波

现在我们考虑有周期性排列在三维拓扑绝缘体表面上的局域自旋组成的格点上的自旋波激发，比如在一维自旋链或者二维正方格点上。这里，为了简化问题，我们只考虑带隙没有打开和弯曲效应可以忽略的情形，并把自旋量子化

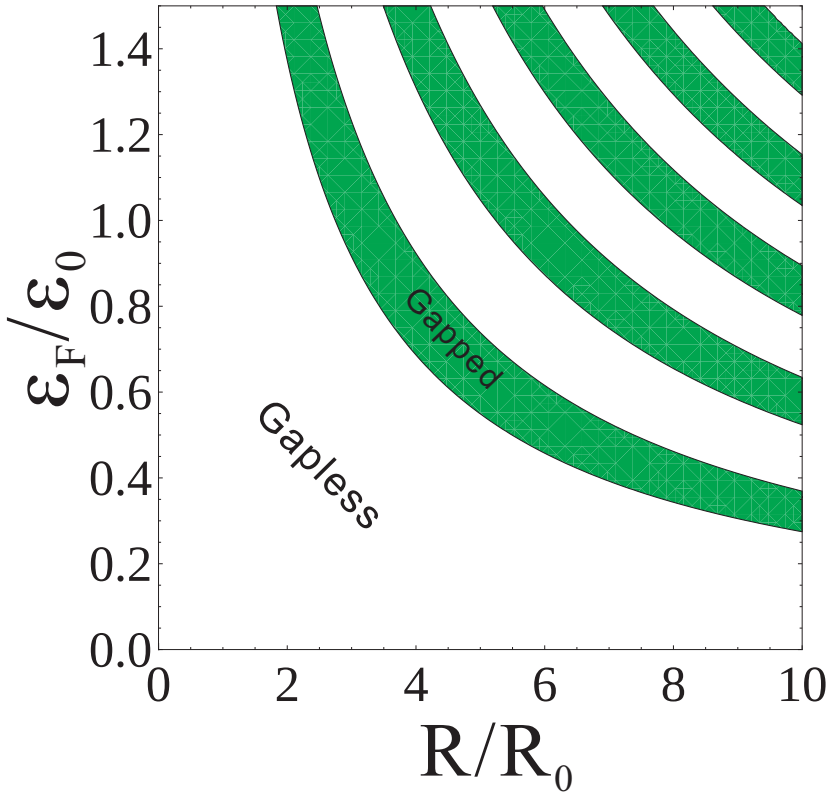

图 3.4: 自旋波激发的能隙 E_g 依赖于 R 和 ε_F 的相图。阴影部分表示有带隙相，空白部分表示无带隙相。

轴旋转到 y 方向。在这样的自旋格点上系统哈密顿量可以写为 [22]

$$H_0^{sw} = \sum_{ij} \frac{|F_2| + i|F_1|}{2} S_i^+ S_j^- + \frac{|F_2| - i|F_1|}{2} S_i^- S_j^+ + |F_2| \Delta S_{iz} S_{jz}, \tag{3.10}$$

其中参数 $\Delta = 1 + F_3/|F_2|$ 表征 RKKY 相互作用的各向异性。假设系统基态是反铁磁性的并且只考虑最近邻耦合，我们利用标准的 Holstein-Primakoff 变换将哈密顿量变换为

$$\begin{aligned} H_0^{sw} &= -N\frac{Z}{2}|F_2|\Delta S^2 + Z|F_2|\Delta S\left(\sum_i a_i^\dagger a_i + \sum_j b_j^\dagger b_j\right) \\ &\quad + |F_2| S \sum_{i\delta}\left(Y a_i b_{i+\delta} + Y^* a_i^\dagger b_{i+\delta}^\dagger\right), \end{aligned} \tag{3.11}$$

其中 $Y = 1 + i\lambda$ 和 $Y^* = 1 - i\lambda$。$\lambda \equiv |F_1/F_2|$ 表示 DM 相互作用与海森堡相互作用的比率。$a\left(a^\dagger\right)$ 和 $b\left(b^\dagger\right)$ 是两种不同子格点自选偏离的消灭（产生）算符。

N 是总自旋数，Z 是局域自旋的配位数。我们先后应用傅里叶变换和波戈留波夫（Bogoliubov）变换，可以把哈密顿量对角化如下

$$\begin{aligned} H_0^{sw} &= -\frac{NZ\left|F_2\right|\Delta S\left(S+1\right)}{2}+\sum_k \hbar\omega_k[\left(\alpha_k^{\dagger}\alpha_k+\frac{1}{2}\right) \\ &\quad +\left(\beta_k^{\dagger}\beta_k+\frac{1}{2}\right)] \end{aligned} \tag{3.12}$$

其中自旋波的能谱为 $\hbar\omega_k = Z\left|F_2\right| S\sqrt{\Delta^2-\left(1+\lambda^2\right)\gamma_k^2}$。我们注意到当 $\Delta > 0$ 时，自旋波能谱会打开能隙。能隙 E_g 敏感依赖于表面态的费米能 ε_F 和局域自旋的最近邻间距 R。图 3.4 展示的是人们可以通过调节表面态的费米能和局域自旋间距来控制自旋波激发的能谱在有能隙和无能隙之间转换。

3.6 本章小结

本章我们提出了一种对三维拓扑绝缘体表面载流子中介的自旋自旋相互作用的电操控方案，即利用 RKKY 相互作用和 BR 相互作用来操控表面磁性。螺旋表面态会导致扭曲的 DM 相互作用和面内的伊辛相互作用。能隙打开效应和弯曲效应分别会在低费米能处和高费米能处引入各向同性伊辛项和各向异性伊辛项。这种自旋自旋相互作用可以通过调节费米能实现各种自旋模型，例如 DM 模型、XXZ 模型和 XZ 模型。我们证明这些模型不会被时间反演对称性破缺导致的能隙打开效应以及弯曲效应所破坏。三维拓扑绝缘体的表面磁性给我们提供了一个模型平台来研究自旋构形和各种自旋模型的动力学（例如自旋波），而且开辟了探索新的基本物理和新型自旋电子学器件的道路。

参考文献

[1] B. A. Bernevig, T. L. Hughes and S. C. Zhang, Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells, Science **314**, 1757 (2006).

[2] M. König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells, Science **318**, 766 (2003).

[3] J. Li and K. Chang, Electric field driven quantum phase transition between band insulator and topological insulator, Appl. Phys. Lett. **95**, 222110 (2009).

[4] L. Fu and C. L. Kane, Topological insulators with inversion symmetry, Phys. Rev. B **76**, 045302 (2007).

[5] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, M. Z. Hasan, A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase, Nature **452**, 970 (2008).

[6] Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang and Shou-Cheng Zhang, Topological insulators in Bi_2Se_3, Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface, Nat. Phys. **5**, 438 (2009).

[7] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L.Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan, Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface, Nat. Phys. **5**, 398 (2009).

[8] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain,

Z.-X. Shen, Experimental Realization of a Three-Dimensional Topological Insulator, Bi_2Te_3, Science **325**, 178 (2009).

[9] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, J. H. Dil, F. Meier, J. Osterwalder, L. Patthey, J. G. Checkelsky, N. P. Ong, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, M. Z. Hasan, A tunable topological insulator in the spin helical Dirac transport regime, Nature **460**, 1101 (2009).

[10] J. Chen, H. J. Qin, F. Yang, J. Liu, T. Guan, F. M. Qu, G. H. Zhang, J. R. Shi, X. C. Xie, C. L. Yang, K. H.Wu, Y. Q. Li and L. Lu, Gate-Voltage Control of Chemical Potential andWeak Antilocalization in Bi_2Se_3, Phys. Rev. Lett. **105**, 176602 (2010).

[11] Qin Liu, Chao-Xing Liu, Cenke Xu, Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang, Magnetic Impurities on the Surface of a Topological Insulator, Phys. Rev. Lett. **102**, 156603 (2009).

[12] F. Ye, G. H. Ding, H. Zhai and Z. B. Su, Spin helix of magnetic impurities in two-dimensional helical metal, Europhys. Lett. **90**, 47001 (2010).

[13] Rudro R. Biswas and A. V. Balatsky, Impurity-induced states on the surface of three-dimensional topological insulators, Phys. Rev. B **81**, 233405 (2010).

[14] Y. L. Chen, J.-H. Chu, J. G. Analytis, Z. K. Liu, K. Igarashi, H.-H. Kuo, X. L. Qi, S. K. Mo, R. G. Moore, D. H. Lu, M. Hashimoto, T. Sasagawa, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, Z. X. Shen, Massive Dirac Fermion on the Surface of a Magnetically Doped Topological Insulator, Science **329**, 659 (2010).

[15] K. Kuroda, M. Arita, K. Miyamoto, M. Ye, J. Jiang, A. Kimura, E. E. Krasovskii, E.V. Chulkov, H. Iwasawa, T. Okuda, K. Shimada, Y. Ueda, H. Namatame and M. Taniguchi, Hexagonally Deformed Fermi Surface of the 3D Topological Insulator Bi_2Se_3, Phys. Rev. Lett. **105**, 076802 (2010).

[16] L. Fu, HexagonalWarping Effects in the Surface States of the Topological Insulator Bi_2Se_3, Phys. Rev. Lett. **103**, 266801 (2009).

[17] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products (Sixth Edition)*, (Academic Press, New York, 2000), pp. 1022.

[18] N. Bloembergen and T. J. Rowland, Nuclear Spin Exchange in Solids: Tl^{203} and Tl^{205} Magnetic Resonance in Thallium and Thallic Oxide, Phys. Rev. **97**, 1679 (1955).

[19] X. G. Wen, F. Wilczek and A. Zee, Chiral spin states and superconductivity, Phys. Rev. B **39**, 11413 (1989).

[20] Y. Taguchi, Y. Oohara, H. Yoshizawa, N. Nagaosa, Y. Tokura, Spin Chirality, Berry Phase, and Anomalous Hall Effect in a Frustrated Ferromagnetnet Science **291**, 2573 (2001).

[21] Daniel Grohol, Kittiwit Matan, Jin-Hyung Cho, Seung-Hun Lee, Jeffrey W. Lynn, Daniel G. Nocera and Young S. Lee, Spin chirality on a two-dimensional frustrated lattice, Nat. Mater. **4**, 323 (2005).

[22] A. Benyoussef, A. Boubekri and H. Ez-Zahraouy, Spin-wave analysis of the XXZ Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction, Physica B **266**, 382 (1999).

第四章　石墨烯 PN 结上门电压控制的磁性

4.1　引言

石墨烯，即单层石墨，由于其无质量相对论性的色散关系、零带隙、电子的旋量型两分量波函数以及高迁移率，吸引了人们很大的研究兴趣 [1]。由于这些独特的性质，石墨烯上有许多有趣的现象，例如 Klein 遂穿 [2]、震颤 [3, 4]、反常整数量子霍尔效应 [5]、弱离域化 [6] 以及石墨烯 PN 结上的 Veselago 透镜 [7] 等。这些新奇的物理现象，特别是其中新奇的输运现象，使石墨烯成为下一代电子学最为热门和最有希望的候选材料 [8]。比如说，人们可以利用石墨烯上电子的高迁移率和大的平均自由程来设计高速石墨烯晶体管器件 [9]。PN 结是电子学中最重要的器件之一，相应地，石墨烯 PN 结也同样是石墨烯电子学中最受关注的器件 [10]。石墨烯 PN 结可以通过顶/底门电压用电学手段实现 [11]。

石墨烯上的局域自旋可以是磁吸附离子 [11] 或是点缺陷。如果我们能够用纯电学手段控制石墨烯中的 RKKY 相互作用，我们就能够同时利用石墨烯上超高速的频率响应和通过 RKKY 相互作用对磁矩作电控制的双重优点。但是，之前关于石墨烯上 RKKY 相互作用的文献显示石墨烯上的 RKKY 相互作用并不容易被操控，这是因为石墨烯上只有一个参数（即化学势）可以被调控，而通过调控化学势来控制石墨烯上的 RKKY 相互作用又是相当低效的 [12–18]。幸运的是，有偏转角结构的石墨烯 PN 结提供给我们一个新的参数，即 PN 结的偏转角，来增强 RKKY 相互作用的可控性 [19]。我们的工作主要研究偏转角和化学势是如何影响 RKKY 相互作用的。

在接下来的几节中，我们把注意力投向在偏转石墨烯 PN 结中 RKKY 相互作用的电学可控性。我们将展示在石墨烯上门电压将如何被用于电操控自旋自旋相互作用。RKKY 相互作用提供了通过改变门电极的强度和偏转角来改变 RKKY 相互作用的程函数从而实现量子计算方案的可能性。

4.2　RKKY 相互作用与石墨烯 PN 结

我们这里考虑一个联结左右两个区域的 PN 结。石墨烯被放置在一个劈裂

门的上方，这样在左方制造出一个 n 型区域，在右方制造出一个 p 型区域，如图 4.1(a) 所示。能谱图标注出相对于价带和导带接触点的费米能。为了简化问题，假设 PN 结是对称的。我们设 n 型区的费米能级在狄拉克点上方 ε_F，而 p 型区的费米能级则在狄拉克点下方 ε_F（见图 4.1(b)）。PN 结的势改变或者是突变型的或者是渐变型的，这两种情况在后面都将详细讨论到。

两局域自旋 $\mathbf{S}_1$ 和 $\mathbf{S}_2$ 分别位于电极的 $\mathbf{R}_1$ 和 $\mathbf{R}_2$ 位置，可以放置在 PN 结的任意一边。两局域自旋间以石墨烯上无质量狄拉克电子为媒介。系统哈密顿量可以写为 [13]，

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_i, && (4.1)\\ H_0 &= \hbar v \left(\tau_x \otimes p_z k_x + \tau_y \otimes p_0 k_y\right), && (4.2)\\ H_i &= -J \sum_{i=1,2} \left[1 + (-1)^s \tau_z\right] \left(\mathbf{S}_i \cdot \sigma\right) \delta\left(\mathbf{R} - \mathbf{R}_i\right), && (4.3) \end{aligned}$$

其中矩阵 τ 作用在两不等价子格点的实空间里，矩阵 $\mathbf{p}$ 作用在两不等价狄拉克点的倒空间中，矩阵 σ 则作用在电子的自旋空间中。$\mathbf{k}$ 是电子的动量，$v \sim 10^6 \mathrm{m/s}$ 是石墨烯上电子的费米速度，$J \sim 2.62\ \mathrm{eV}\mathring{A}^2$ 代表 s-d 交换相互作用的强度。参数 $s = 0, 1$ 标识两种不等价子格点。这种 s-d 交换相互作用的形式敏感于两类子格点上磁杂质的位置。

两局域自旋间的 RKKY 相互作用能量可以从传导电子对局域自旋能量最低阶交换贡献做微扰计算得到。我们计算期待值 $\langle H_i \rangle$ 并在做平均时只计入第一阶交换耦合。因此，我们需要对第一个局域自旋位置的传导电子自旋密度受第二个局域自旋的影响做微扰计算，反之亦然，再对这两项贡献求和，从而得到总相互作用能量。

$$\begin{aligned} H_{RKKY} &= \frac{2}{\pi} \mathrm{Im} J^2 \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \mathrm{Tr}[\left(\mathbf{S}_1 \cdot \sigma_1\right) G_{(0)}\left(\mathbf{R}_{12}, \varepsilon\right) \\ &\quad \times \left(\mathbf{S}_2 \cdot \sigma_2\right) G_{(0)}\left(-\mathbf{R}_{12}, \varepsilon\right)]. \end{aligned} \quad (4.4)$$

其中 ε_F 是费米能，$\mathbf{R}_{12} \equiv \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$，格林函数 $G_{(0)}$ 为因果格林函数。Tr 表示对巡游狄拉克电子的自旋自由度部分求迹。

4.2.1 突变型石墨烯 PN 结的 RKKY 相互作用

动量空间中相应于哈密顿量 H_0 的格林函数的形式为

$$G_0\left(\mathbf{k}\right) = \frac{\varepsilon + i\delta \mathrm{sgn}\left(\varepsilon\right) + \hbar v \left(\tau_x \otimes p_z k_x + \tau_y \otimes p_0 k_y\right)}{\left[\varepsilon + i\delta \mathrm{sgn}\left(\varepsilon\right)\right]^2 - \varepsilon_k^2}. \quad (4.5)$$

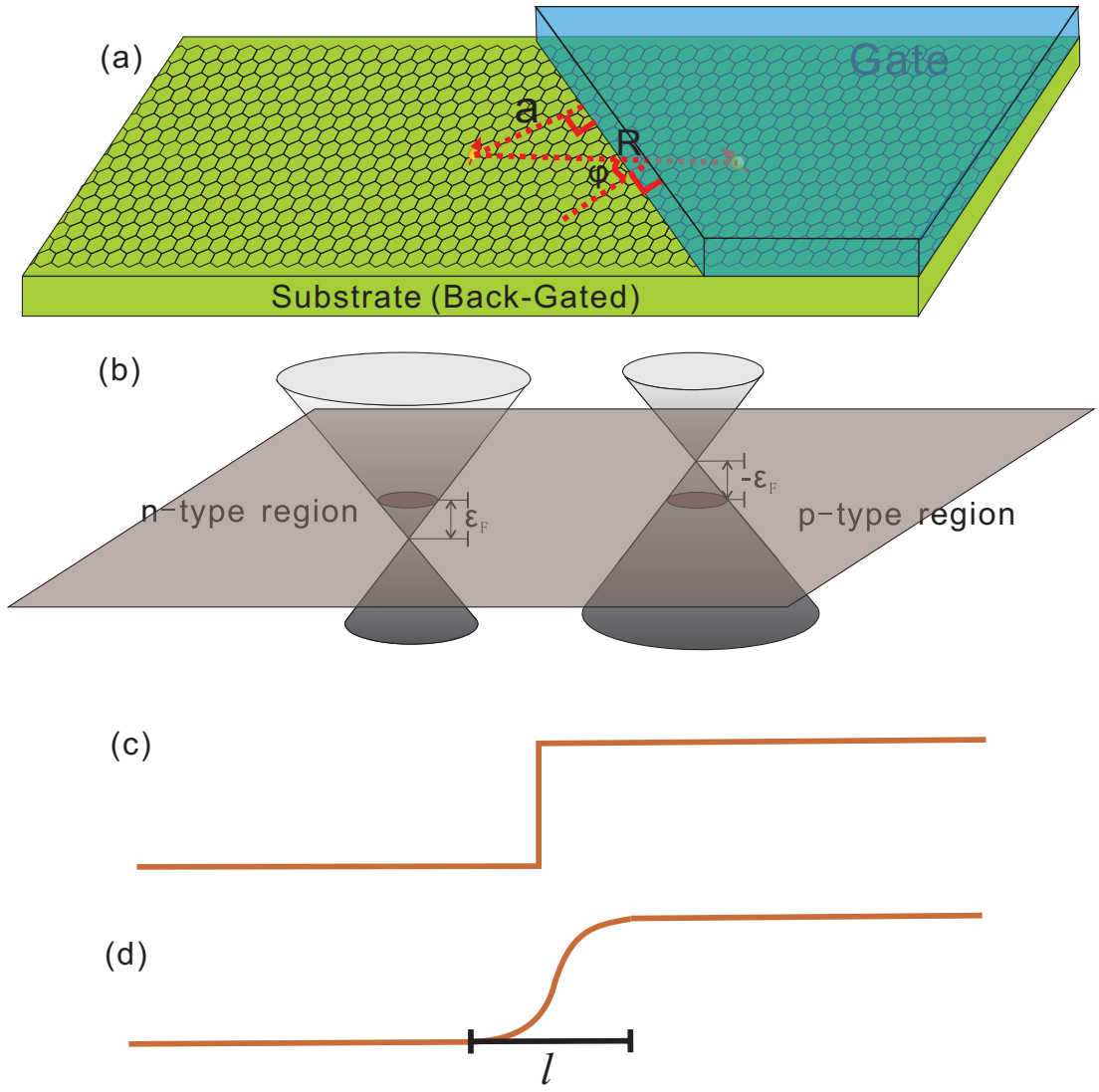

图 4.1: (a) 偏转石墨烯 PN 结上两磁杂质的示意图。顶门电极和底门电极可以用来控制 PN 结两边电子或空穴的载流子密度。φ 是石墨烯 PN 结的偏转角，可以被定义为两磁杂质间的连线与 PN 结界面的夹角。(b) 能谱图标明了相对价带和导带接触点的费米能级的位置。(c) 突变型 PN 结的电势示意图。(d) 渐变型 PN 结的电势示意图。l 是渐变型 PN 结的宽度。

能量坐标表象下相应的格林函数可以通过在每个能谷附近对 $G_0(\mathbf{k})$ 的动量积分得到。

$$\begin{aligned} G_0(\pm\mathbf{R}) &= e^{\pm it\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{R}}[-i\frac{\varepsilon\tau_0\otimes p_0}{4\hbar^2v^2}H_0^{(1)}\left(\frac{R\varepsilon}{\hbar v}\right) \\ &\quad \pm\frac{\varepsilon\left(\tau_x\otimes p_zR_x+\tau_y\otimes p_0R_y\right)}{4\hbar^2v^2R}H_1^{(1)}\left(\frac{R\varepsilon}{\hbar v}\right)], \end{aligned} \tag{4.6}$$

其中 $t=\pm1$ 分别相应于位于 $\pm\mathbf{k}_0$ 的两个能谷。$H_\nu^{(1)}(z)$ 是第一类第 ν 阶汉克尔函数。

我们先考虑突变型的石墨烯 PN 结。在圈图近似下，我们得到两相距为 R 的局域自旋 $\mathbf{S}_1$ 和 $\mathbf{S}_2$ 的 RKKY 相互作用，这两个局域自旋分别位于 n 型区和 p 型区。

$$\begin{aligned} H_{RKKY}^{np} &= -\frac{J^2}{\pi\hbar vR^3}\{\frac{1}{4}\delta_{ss'}-\frac{3}{4}(1-\delta_{ss'})-\frac{2}{\sqrt{\pi}}[\delta_{ss'} \\ &\quad\times G_{2,4}^{2,1}\left(\frac{R^2\varepsilon_F^2\cos^2\varphi}{\hbar^2v^2}\left[1+\frac{R^2\sin^2\varphi}{(2a-R\cos\varphi)^2}\right]\Big|\begin{matrix}1,2\\ \frac{3}{2},\frac{3}{2},0,\frac{3}{2}\end{matrix}\right) \\ &\quad+(1-\delta_{ss'})G_{2,4}^{2,1}\left(\frac{R^2\varepsilon_F^2\cos^2\varphi}{\hbar^2v^2}\left[1+\frac{R^2\sin^2\varphi}{(2a-R\cos\varphi)^2}\right]\Big|\begin{matrix}1,2\\ \frac{3}{2},\frac{5}{2},0,\frac{1}{2}\end{matrix}\right)]\} \\ &\quad\times(\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2), \end{aligned} \tag{4.7}$$

其中角度 φ 是门电极的倾斜角，与两局域自旋间连线偏离 PN 结界面法线方向的角度相同。参数 a 描述两局域自旋之一的 $\mathbf{S}_1$ 与 PN 结界面的距离。$\delta_{ss'}=1\,(0)$ 表示局域自旋在相同（不同）子格点上（见图 4.1(a)）。

从这个 RKKY 相互作用公式出发，我们可以看到自旋自旋相互作用总是海森堡型的。程函数依赖于四个参数：两磁杂质间的间距 R、石墨烯上狄拉克电子的费米能 ε_F、PN 结的倾斜角 φ 和一个磁杂质与 PN 结界面的距离 a。由于局域自旋的位置一般而言是不易移动的，所以我们把注意力集中于两个可调参数 ε_F 和 φ。

图 5.2 所示是程函数对距离 R、费米能 ε_F 和角 φ 的依赖关系。从图 4.2 中我们能看到 RKKY 相互作用的普通特征：RKKY 相互作用随两自旋间距 R 的增加、费米能趋于零或倾斜角 φ 趋于界面的法线方向而振荡衰减。在图 4.2(a) 和 (b) 中，当距离 R 小于某一临界值 R^c 时，程函数并不改变其数值。这意味

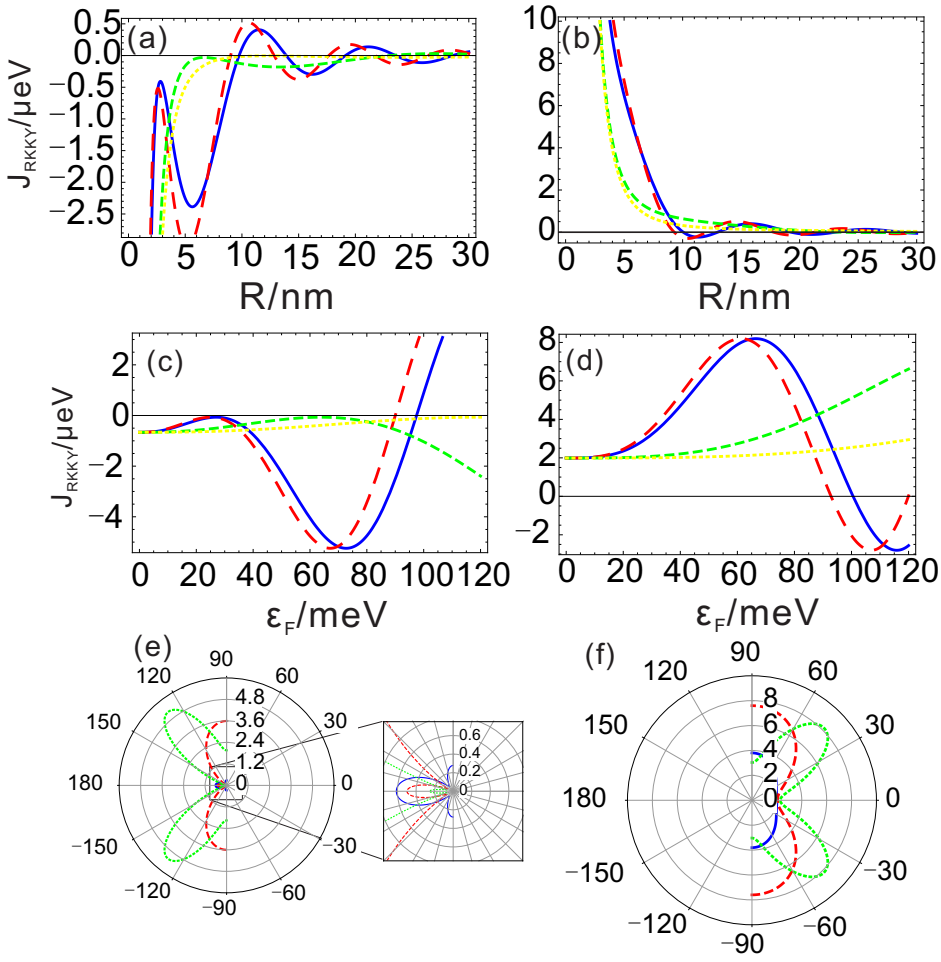

图 4.2: 突变型石墨烯 PN 结上 n-p 自旋构形的 RKKY 相互作用程函数对局域自旋间距 R (图 (a),(b))、狄拉克电子的费米能 ε_F(图 (c),(d)) 以及两局域自旋间连线与 PN 结界面法线夹角 φ(图 (e),(f)) 的依赖关系。图 (a),(c),(e) 中的局域自旋处于相同子格点中，图 (b),(d),(f) 处于不同子格点中。图 (a)-(d) 中蓝（实）线代表 $\varphi = \pi/3$，红（长虚）线代表 $\varphi = \pi/4$，绿（短虚）线代表 $\varphi = \pi/6$，黄（点）线代表 $\varphi = 0$。图 (e),(f) 中，蓝（实）线代表 $\varepsilon_F = 30$meV，红（长虚）线代表 $\varepsilon_F = 50$meV，绿（短虚）线代表 $\varepsilon_F = 80$meV。在图 (a)-(d) 中我们选择参数 $a = 0.3R$，图 (a),(b) 中选择参数 $\varepsilon_F = 50$meV，图 (c)-(f) 中选择参数 $R = 5$nm，图 (e),(f) 中选择参数 $a = 0.6R\cos\varphi$。图 (e),(f) 中左半平面的表示程函数的数值是负的，即程函数的负半平面。

着两局域自旋相距不太远时，RKKY 相互作用在相同子格点总是铁磁性的，在不同子格点总是反铁磁的。当我们对比图 4.4(a) 和 (b) 时，这一特性更加明显：当 $R = 5$ nm 时，, 程函数在图 4.4(a) 中总是负的，在图 4.4(b) 中总是正的。如果我们期待得到 RKKY 相互作用的铁磁或反铁磁特性，那么我们就把两局域自旋置于比较近的距离，保证其间距小于临界值 R^c；如果我们期待得到 RKKY 相互作用的振荡特性，那么我们只需要把两局域自旋放置在临界距离 R^c 以外。注意不同子格点上程函数的数值大于相同参数下相同子格点的程函数，振荡会随着角 φ 减小而逐渐消失。

相似的，当费米能 ε_F 小于某临界值 ε_F^c 时，程函数同样不改变其符号。从图 4.2(c) 和 (d) 中，我们能看到 RKKY 相互作用在 $\varepsilon_F = 0$ 时，即 PN 结消失时，并不为零，但是在某些特定的临界值 ε_F^c 处会消失。这表明我们可以通过调节费米能和角 φ，或者换句话说通过调节门电压和 PN 结的倾斜角来开关 RKKY 相互作用。举个例子，我们可以在 $R = 5$nm, $a = 1.5$nm, $\varphi = \pi/3$ 和 $\varepsilon_F = 97.497$meV 的参数条件下关闭 RKKY 相互作用。

RKKY 相互作用是以石墨烯上的巡游狄拉克手征电子或空穴为媒介的，而石墨烯上手征电子在正入射势垒上散射时为理想透射，即所谓的 Klein 遂穿，这正是石墨烯 PN 结上 RKKY 相互作用依赖于角 φ 的原因。这说明 $\varphi = 0$ 时的 RKKY 程函数与其他 φ 角相比时有其特殊性，而且当 $\varphi = 0$ 时，石墨烯 PN 结上的 RKKY 相互作用与无 PN 结结构的常规石墨烯上 RKKY 相互作用完全相同。然而，我们可以从公式 (4.7) 中计算出角 $\varphi_0 = 2\arctan\sqrt{\frac{R-a}{R+a}}$，角 $\varphi = \varphi_0$ 时的 RKKY 程函数与角 $\varphi = 0$ 时的程函数相同。也就是说，在角 $\varphi = 0$ 或 φ_0 下的 RKKY 相互作用表现得好像没有 PN 结存在似的。这个有趣的现象意味着在 RKKY 相互作用中有其他的路径使巡游电子表现得如同 Klein 遂穿中的电子一样。

然后我们考虑磁杂质 $\mathbf{S}_1$ 和 $\mathbf{S}_2$ 同时处于 n 型区或同时处于 p 型区的情况。经过相似的计算，我们得到 n-n 构形或者 p-p 构形的 RKKY 相互作用

$$\begin{aligned} H_{RKKY}^{nn(pp)} &= -\frac{J^2}{\pi\hbar v R^3}\{\frac{1}{4}\delta_{ss'} - \frac{3}{4}(1-\delta_{ss'}) \\ &\quad -\frac{2}{\sqrt{\pi}}[\delta_{ss'}G_{2,4}^{2,1}\left(\frac{R^2\varepsilon_F^2}{\hbar^2v^2}\Big|\begin{matrix}1,2\\ \frac{3}{2},\frac{3}{2},0,\frac{3}{2}\end{matrix}\right) \\ &\quad +(1-\delta_{ss'})\,G_{2,4}^{2,1}\left(\frac{R^2\varepsilon_F^2}{\hbar^2v^2}\Big|\begin{matrix}1,2\\ \frac{3}{2},\frac{5}{2},0,\frac{1}{2}\end{matrix}\right)]\}\,(\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2)\,. \end{aligned} \tag{4.8}$$

n-n 构形的 RKKY 相互作用表达式与 p-p 构形的 RKKY 相互作用的表达式相同。

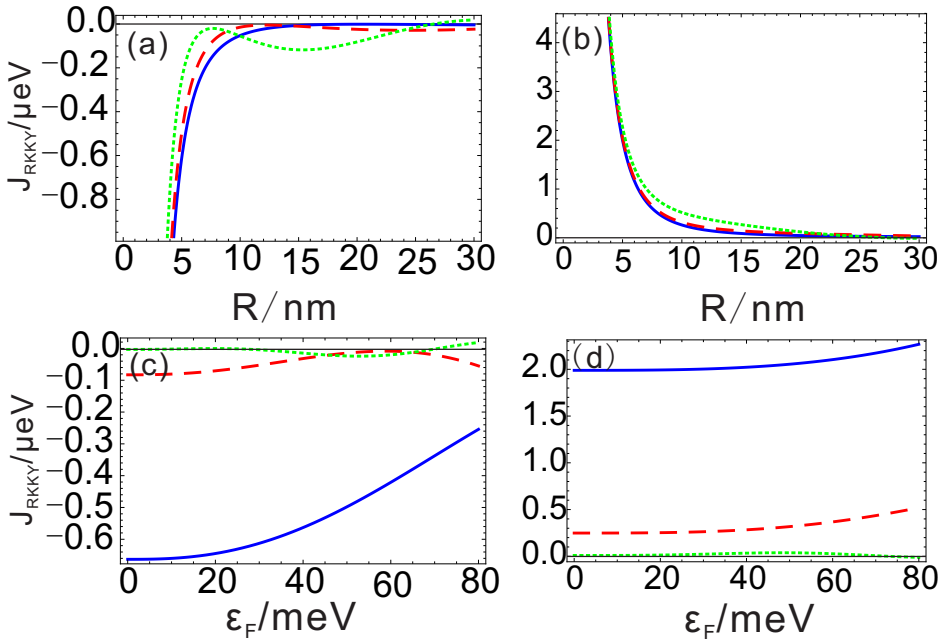

图 4.3: n-n 或者 p-p 构形的突变型石墨烯 PN 结中 RKKY 相互作用的程函数对两局域自旋间距 R(图 (a),(b)) 或狄拉克电子的费米能 ε_F(图 (c),(d)) 的依赖关系。图 (a),(c) 中的局域自旋位于相同子格点，图 (b),(d) 中的局域自旋位于不同的子格点。在图 (a),(b) 中，蓝（实）线代表 $\varepsilon_F = 30$meV，红（长虚）线代表 $\varepsilon_F = 50$meV，绿（短虚）线代表 $\varepsilon_F = 80$meV。在图 (c),(d) 中，蓝（实）线代表 $R = 5$nm，红（长虚）线代表 $R = 10$nm，绿（短虚）线代表 $R = 30$nm。

n-n (p-p) 构形的 RKKY 相互作用的参数依赖如图 4.3 所示。对角度 φ 的依赖消失了，有效的参数只有距离 R 和费米能 ε_F，这与无 PN 结的石墨烯上 RKKY 相互作用完全相同。n-n (p-p) 构形的 RKKY 相互作用与 n-p 构形的 RKKY 相互作用的不同之处在于相同参数条件下 n-n (p-p) 构形的衰减要更快。从图 5.3 中我们能看到当我们调节费米能或改变磁杂质的间距时，我们很难使程函数的数值取零。这意味着在没有 PN 结结构时 RKKY 相互作用的可控性很低，我们可能无法实现 RKKY 相互作用的开关。

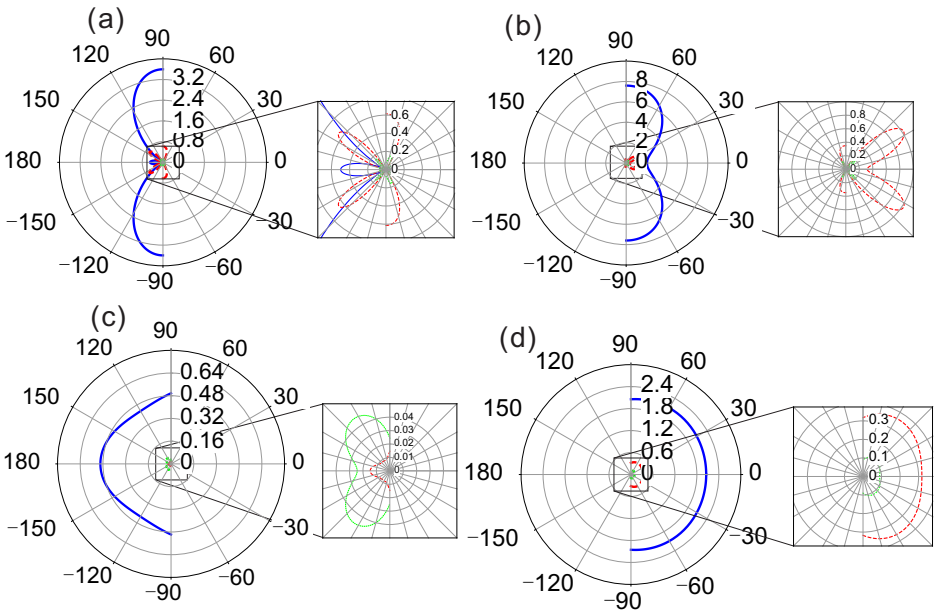

图 4.4: 在突变型石墨烯 PN 结 (a),(b) 或渐变型石墨烯 PN 结 (c),(d) 上 RKKY 相互作用程函数对两局域自旋连线与 PN 结界面法线夹角 φ 的依赖关系。图 (a),(c) 中的磁杂质是在相同子格点上的，图 (b),(d) 中的磁杂质是在不同子格点上的。蓝（实）线代表 $R = 5\text{nm}$，红（长虚）线代表 $R = 10\text{nm}$，绿（短虚）线代表 $R = 20\text{nm}$。我们选择参数 $a = 0.6R\cos\varphi, l = 0.4R\cos\varphi$、$\varepsilon_F = 50\text{meV}$。左半平面代表负半平面。

4.2.2 渐变型石墨烯 PN 结的 RKKY 相互作用

到此为止我们展示了突变型偏转石墨烯 PN 结上 RKKY 相互作用的高可控性和一些有趣的性质。这些性质可以被用来实现量子计算方案和自旋阵列。然而，制造突变型 PN 结要求很高的电子技术水平，并不是很容易实现。所以我们接下来把注意力转移到更容易制造的渐变型偏转 PN 结上去。我们假设渐变型 PN 结的宽度为 l 而且界面区的电势降是平滑的。参数 a 描述 $\mathbf{S}_1$ 与相邻

的 PN 结界面之间的距离。通过类似的计算可得 RKKY 相互作用的表达式为

$$
\begin{aligned}
H_{RKKY}^{np(g)} &= -\frac{J^2}{\pi\hbar v R^3}\{\frac{1}{4}\delta_{ss'}-\frac{3}{4}\left(1-\delta_{ss'}\right) \\
&\quad -\frac{2}{\sqrt{\pi}}[\delta_{ss'}G_{2,4}^{2,1}(\frac{\varepsilon_F^2}{\hbar^2v^2}\left[R^2\sin^2\varphi+\left(2a+l-R\cos\varphi\right)^2\right] \\
&\quad \times\left[\frac{R\cos\varphi-l}{2a+l-R\cos\varphi}+l\frac{\arctan\frac{R\sin\varphi}{2a+l-R\cos\varphi}}{R\sin\varphi}\right]^2 \Big| \begin{matrix}1,2\\ \frac{3}{2},\frac{3}{2},0,\frac{3}{2}\end{matrix}) \\
&\quad +\left(1-\delta_{ss'}\right)G_{2,4}^{2,1}(\frac{\varepsilon_F^2}{\hbar^2v^2}\left[R^2\sin^2\varphi+\left(2a+l-R\cos\varphi\right)^2\right] \\
&\quad \times\left[\frac{R\cos\varphi-l}{2a+l-R\cos\varphi}+l\frac{\arctan\frac{R\sin\varphi}{2a+l-R\cos\varphi}}{R\sin\varphi}\right]^2 \Big| \begin{matrix}1,2\\ \frac{3}{2},\frac{5}{2},0,\frac{1}{2}\end{matrix})]\} \\
&\quad \times\left(\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2\right) \qquad (4.9)
\end{aligned}
$$

从这个表达式我们可以发现渐变型偏转石墨烯 PN 结上 RKKY 相互作用的程函数由五个参数所决定。除了 R、a、φ 和 ε_F 四个与突变型 PN 结类似的参数外，还有一个新的参数 l，即渐变型 PN 结的宽度。在图 5.4 中我们比较了渐变型 PN 结与突变型 PN 结的 RKKY 相互作用的角度依赖。渐变型 PN 结上的 RKKY 程函数与突变型 PN 结上的定性相同，不过振荡幅度更弱。

在渐变型 PN 结中同样存在与零偏角等价的偏转角，不过与突变型 PN 结中的相比有一些不同。事实上，我们可以从公式 (4.9) 中计算出一个临界角 $\varphi_c\simeq 22.975°$，在这个临界角以上总是存在一个角度 φ_0' 其 RKKY 程函数与角 $\varphi=0$ 的相同，小于这个临界角 φ_0' 则不存在。角度 φ_0' 由参数 a 和 l 决定。例如在参数 $a=0.3R$ 且 $l=0.2R$ 时，角度 $\varphi_0'\simeq 62.396°$。

4.3　本章小结

本章处理了偏转石墨烯 PN 结上的 RKKY 相互作用，分别考虑了突变型和渐变型两种 PN 结。我们得到了不同的自旋放置下 RKKY 相互作用的表达式，并且探讨了 RKKY 程函数的参数依赖。研究表明，我们可以通过调节 PN 结的偏转角和石墨烯的化学势，即调节门电极的强度和偏转角来电调控 RKKY 相互作用。石墨烯上有 PN 结结构的 RKKY 相互作用的可控性比无此结构的 RKKY 相互作用要高得多。RKKY 相互作用能够被用来设计石墨烯电子学的量子计算方案，并且开辟了对磁器件做高速电操控的新途径。

参考文献

[1] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, The electronic properties of graphene, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).

[2] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene, Nat. Phys. **2**, 620 (2006).

[3] M. I. Katsnelson, Zitterbewegung, chirality, and minimal conductivity in graphene, Eur. Phys. J. B **51**, 157 (2006).

[4] T. M. Rusin and W. Zawadzki, Zitterbewegung of electrons in graphene in a magnetic field, Phys. Rev. B **78**, 125419 (2008).

[5] Y. Zhang, Y. W. Tan, and P. Kim, Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’ s phase in graphene, Nature **438**, 201 (2005).

[6] X. Wu, X. Li, Z. Song, C. Berger, and W. A. de Heer, Weak Antilocalization in Epitaxial Graphene: Evidence for Chiral Electrons, Phys. Rev. Lett. **98**, 136801 (2007).

[7] V. V. Cheianov, V. Fal’ko, and B. L. Altshuler, The Focusing of Electron Flow and a Veselago Lens in Graphene p-n Junctions, Science **315**, 1252 (2007).

[8] A. K. Geim and K. S. Novoselov, The rise of graphene, Nat. Mater. **6**, 183 (2007).

[9] L. Liao, Y.-C. Lin, M.-Q. Bao, R. Cheng, J.-W. Bai, Y. Liu, Y.-Q. Qu, K. L. Wang, Y. Huang, and X.-F. Duan, High-speed graphene transistors with a self-aligned nanowire gate, Nature **467**, 305 (2010).

[10] T. Low, S. Hong, J. Appenzeller, S. Datta, and M. S. Lundstrom, Conductance Asymmetry of Graphene p-n Junction, IEEE Trans. Electr. Dev. **56,** 1292 (2009).

[11] J. R. Williams, L. DiCarlo, C. M. Marcus, Quantum Hall Effect in a Gate-Controlled p-n Junction of Graphene, Science **317**, 638 (2007).

[12] M. A. H. Vozmediano, M. P. López-Sancho, T. Stauber, and F. Guinea, Local defects and ferromagnetism in graphene layers, Phys. Rev. B **72**, 155121 (2005).

[13] V. K. Dugaev, V. I. Litvinov, and J. Barnas, Exchange interaction of magnetic impurities in graphene, Phys. Rev. B **74**, 224438 (2006).

[14] L. Brey, H. A. Fertig, and S. Das Sarma, Diluted Graphene Antiferromagnet, Phys. Rev. Lett. **99**, 116802 (2007).

[15] S. Saremi, RKKY in half-filled bipartite lattices: Graphene as an example, Phys. Rev. B **76**, 184430 (2007).

[16] E. H. Hwang and S. Das Sarma, Screening, Kohn Anomaly, Friedel Oscillation, and RKKY Interaction in Bilayer Graphene, Phys. Rev.Lett. **101**, 156802 (2008).

[17] A. M. Black-Schaffer, RKKY coupling in graphene, Phys. Rev. B **81**, 205416 (2010).

[18] M. Sherafati and S. Satpathy, RKKY interaction in graphene from the lattice Green' s function, Phys. Rev. B **83**, 165425 (2011).

[19] T. Low and J. Appenzeller, Electronic transport properties of a tilted graphene p-n junction, Phys. Rev. B **80**, 155406 (2009).

第五章　结论

本论文基于非平衡格林函数方法，从理论上研究了一维半导体电子气、三维拓扑绝缘体表面态和石墨烯 PN 结上的 RKKY 相互作用，细致的分析了各种体系中 RKKY 相互作用的参数依赖及其与对体系巡游磁性的电操控的影响，并研究了与我们所研究的巡游磁性相关的一些物理现象，提出了 RKKY 机制的电学控制磁性的一些可能的应用。

现简要总结本论文取得的主要研究成果如下：

1. 我们应用格林函数理论研究了同时考虑 Rashba 和 Dresselhaus 两种自旋轨道耦合的量子线，提出可以利用电场调节巡游电子的自旋轨道耦合参数，从而控制其自旋分布，并进而利用这些巡游电子通过 RKKY 间接交换相互作用来传递磁耦合，实现对磁杂质或局域自旋的电控制。我们仔细分析了 RKKY 相互作用对外加电场和材料晶向的依赖特性，提出这种特性可以被用来构建各种不同的自旋模型，并且试探性地构造了一个包含超相干量子比特的量子计算方案。

2. 我们研究了扑绝缘体材料中电控制的表面磁性，给出了三维拓扑绝缘体表面态上 RKKY 相互作用的严格的解析解。由于拓扑绝缘体上独特的自旋极化和手征特性，使得仅通过电场调节费米能就能实现对巡游狄拉克电子自旋分布的影响，从而最终实现电控制的磁相互作用。我们在三维拓扑绝缘体表面态上构建了各种自旋模型及其相应的自旋构形和反常霍尔效应，研究了拓扑绝缘体表面的低能自旋波激发。

3. 我们把电控制的磁性研究扩展到石墨烯器件中，利用了石墨烯材料迁移率高、系统的频率响应速度快等优点，把电控制的磁性机制推广到石墨烯器件上，对实际的自旋电子学器件的实现将起到重要作用。由于 RKKY 相互作用在普通石墨烯上是难以被调控的，我们引入了偏转 PN 结的结构，十分漂亮地实现了电控制的磁性，并且通过门电压的大小和偏转角两个因素来调节，使我们提出的机制具有很高的可控性。

附录 A　Dresselhaus 自旋轨道耦合效应在不同晶面和晶向的表达式

对于闪锌矿体材料，导带 Dresselhaus 自旋轨道耦合的形式为 $H_D^{3d} = \gamma_D \kappa \cdot \sigma$，其中 $\kappa = \left[K_x\left(K_y^2 - K_z^2\right), c.p.\right]$。c.p. 代表 (x, y, z) 轮换，$\mathbf{K} = \mathbf{P}/\hbar$ 为三维波矢，$\mathbf{P}$ 是电子的三维动量算符，H_D^{3d} 产生的自旋劈裂与 K^3 成正比。

对半导体低维结构，当沿某个方向 $(\mathbf{r}_\perp)$ 的限制远远强于其他方向 $\left(\mathbf{r}_{//}\right)$（如量子阱）时，电子波函数可以分离变量 $\psi(\mathbf{r}) = \varphi\left(\mathbf{r}_{//}\right)\chi(\mathbf{r}_\perp)$。作用在平面内波函数 $\varphi\left(\mathbf{r}_{//}\right)$ 上的二维有效 Dresselhaus 自旋轨道耦合项 H_D 由 H_D^{3d} 对 $\chi(\mathbf{r}_\perp)$ 求平均得到。

首先将三维波矢分解为平面内的部分 $\mathbf{k}$ 和沿限制方向 $\mathbf{n}$ 的部分 $\mathbf{q} = q\mathbf{n}$，$\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{q}$，然后利用 $\langle\chi(\mathbf{r}_\perp)|\, q^{2m+1}\,|\chi(\mathbf{r}_\perp)\rangle = 0$ 和 $\langle\chi(\mathbf{r}_\perp)|\, q^{2m}\,|\chi(\mathbf{r}_\perp)\rangle \neq 0$，可得

$$
\begin{aligned}
\langle\kappa_x\rangle = & \left\langle K_x\left(K_y^2 - K_z^2\right)\right\rangle \\
= & \left\langle (k_x + qn_x)\left[(k_y + qn_y)^2 - (k_z + qn_z)^2\right]\right\rangle \\
= & \langle k_x\left(k_y^2 - k_z^2\right) + n_x\left(k_y^2 - k_z^2\right)q + 2k_x\left(k_y n_y - k_z n_z\right)q \\
& + 2n_x\left(k_y n_y - k_z n_z\right)q^2 + k_x\left(n_y^2 - n_z^2\right)q^2 + n_x\left(n_y^2 - n_z^2\right)q^3\rangle \\
= & k_x\left(k_y^2 - k_z^2\right) + n_x\left(k_y^2 - k_z^2\right)\langle q\rangle + 2k_x\left(k_y n_y - k_z n_z\right)\langle q\rangle \\
& + 2n_x\left(k_y n_y - k_z n_z\right)\langle q^2\rangle + k_x\left(n_y^2 - n_z^2\right)\langle q^2\rangle + n_x\left(n_y^2 - n_z^2\right)\langle q^3\rangle \\
= & k_x\left(k_y^2 - k_z^2\right) + 2n_x\left(k_y n_y - k_z n_z\right)\langle q^2\rangle + k_x\left(n_y^2 - n_z^2\right)\langle q^2\rangle
\end{aligned}
$$

同理可得

$$
\begin{aligned}
\langle\kappa_y\rangle = & \; k_y\left(k_z^2 - k_x^2\right) + 2n_y\left(k_z n_z - k_x n_x\right)\langle q^2\rangle + k_y\left(n_z^2 - n_x^2\right)\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_z\rangle = & \; k_z\left(k_x^2 - k_y^2\right) + 2n_z\left(k_x n_x - k_y n_y\right)\langle q^2\rangle + k_z\left(n_x^2 - n_y^2\right)\langle q^2\rangle
\end{aligned}
$$

下面我们写出沿任意方向 n 受限时的二维有效 Dresselhaus 自旋轨道耦合项的表达式，即在各个不同晶面上的 Dresselhaus 自旋轨道耦合的形式

A.1　(001) 面

由 $n_x = n_y = 0, n_z = 1$ 可得

$$\begin{aligned}
\langle\kappa_x\rangle &= k_x\left(k_y^2-k_z^2\right)+2n_x\left(k_yn_y-k_zn_z\right)\langle q^2\rangle+k_x\left(n_y^2-n_z^2\right)\langle q^2\rangle \\
&= k_x\left(k_y^2-k_z^2\right)-k_x\langle q^2\rangle \\
&= k_xk_y^2-k_x\langle q^2\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle\kappa_y\rangle &= k_y\left(k_z^2-k_x^2\right)+2n_y\left(k_zn_z-k_xn_x\right)\langle q^2\rangle+k_y\left(n_z^2-n_x^2\right)\langle q^2\rangle \\
&= -k_x^2k_y+k_y\langle q^2\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle\kappa_z\rangle &= k_z\left(k_x^2-k_y^2\right)+2n_z\left(k_xn_x-k_yn_y\right)\langle q^2\rangle+k_z\left(n_x^2-n_y^2\right)\langle q^2\rangle \\
&= 0
\end{aligned}$$

从而有

$$\begin{aligned}
H_{D(100)}^{[001]} &= \gamma_D\left[\left(k_xk_y^2-k_x\langle q^2\rangle\right)\sigma_x+\left(-k_x^2k_y+k_y\langle q^2\rangle\right)\sigma_y\right] \\
&= -\gamma_D\langle q^2\rangle\left(k_x\sigma_x-k_y\sigma_y\right)+\gamma_Dk_xk_y\left(k_y\sigma_x-k_x\sigma_y\right) \\
&= \beta\left(k_x\sigma_x-k_y\sigma_y\right)+\gamma_Dk_xk_y\left(k_y\sigma_x-k_x\sigma_y\right) \\
&\approx \beta\left(k_x\sigma_x-k_y\sigma_y\right)
\end{aligned}$$

其中 $\beta=-\gamma_D\langle q^2\rangle$。

此时，如果我们转动坐标系使得 x 轴到原来 y 轴的位置，而 y 轴转到原来 -x 轴的位置，这就相当于建立固连于量子阱的新坐标系

$$\begin{cases}
\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_y\|[010] \\
\mathbf{e}_2 = -\mathbf{e}_x\|\left[\bar{1}00\right] \\
\mathbf{e}_3 = \mathbf{n}\|[001]
\end{cases}$$

得

$$\begin{aligned}
\langle\kappa_1\rangle &= \langle\kappa_y\rangle \quad k_x = -k_2 \\
\langle\kappa_2\rangle &= -\langle\kappa_x\rangle \quad k_y = k_1 \\
\langle\kappa_3\rangle &= \langle\kappa_z\rangle \quad k_z = k_3
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
\langle\kappa_x\rangle &= k_xk_y^2-k_x\langle q^2\rangle \\
&= -k_2k_1^2+k_2\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_y\rangle &= -k_x^2k_y+k_y\langle q^2\rangle \\
&= -k_2^2k_1+k_1\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_z\rangle &= 0
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$
\begin{aligned}
\langle\kappa_1\rangle &= \langle\kappa_y\rangle \\
&= -k_1k_2^2 + k_1\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_2\rangle &= -\langle\kappa_x\rangle \\
&= k_1^2k_2 - k_2\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_3\rangle &= \langle\kappa_z\rangle \\
&= 0 \\
\Rightarrow& \\
H_{D(010)}^{[001]} &= \gamma_D\left[\left(-k_1k_2^2 + k_1\langle q^2\rangle\right)\sigma_1 + \left(k_1^2k_2 - k_2\langle q^2\rangle\right)\sigma_2\right] \\
&= \gamma_D\langle q^2\rangle\left(k_1\sigma_1 - k_2\sigma_2\right) - \gamma_Dk_1k_2\left(k_2\sigma_1 - k_1\sigma_2\right) \\
&= -\beta\left(k_1\sigma_1 - k_2\sigma_2\right) - \gamma_Dk_1k_2\left(k_2\sigma_1 - k_1\sigma_2\right) \\
&\approx -\beta\left(k_1\sigma_1 - k_2\sigma_2\right)
\end{aligned}
$$

如果我们转动坐标系使得 x 轴到原来 (110) 方向，而 y 轴转到 $(\bar{1}10)$ 方向，这就相当于建立固连于量子阱的新坐标系

$$
\begin{cases}
\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y\right) \,||\, [110] \\
\mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y\right) \,||\, \left[\bar{1}10\right] \\
\mathbf{e}_3 = \mathbf{n} \,||\, [001]
\end{cases}
$$

得

$$
\begin{aligned}
\langle\kappa_1\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\kappa_x\rangle + \langle\kappa_y\rangle\right) \qquad k_x = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_1 - k_2\right) \\
\langle\kappa_2\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(-\langle\kappa_x\rangle + \langle\kappa_y\rangle\right) \quad k_y = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_1 + k_2\right) \\
\langle\kappa_3\rangle &= \langle\kappa_z\rangle \qquad\qquad\qquad\quad k_z = k_3 \\
\Rightarrow& \\
\langle\kappa_x\rangle &= k_xk_y^2 - k_x\langle q^2\rangle \\
&= \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_1^3 - k_1k_2^2 + k_1^2k_2 - k_2^3\right) - \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_1 - k_2\right)\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_y\rangle &= -k_x^2k_y + k_y\langle q^2\rangle \\
&= -\tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_1^3 - k_1k_2^2 - k_1^2k_2 + k_2^3\right) + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_1 + k_2\right)\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_z\rangle &= 0 \\
\Rightarrow& \\
\langle\kappa_1\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\kappa_x\rangle + \langle\kappa_y\rangle\right) \\
&= \tfrac{1}{2}k_2\left(k_1^2 - k_2^2\right) + k_2\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_2\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(-\langle\kappa_x\rangle + \langle\kappa_y\rangle\right) \\
&= -\tfrac{1}{2}k_1\left(k_1^2 - k_2^2\right) + k_1\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_3\rangle &= \langle\kappa_z\rangle \\
&= 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\Rightarrow \\
H_{D(110)}^{[001]} &= \gamma_D\left[\left(\tfrac{1}{2}k_2\left(k_1^2-k_2^2\right)+k_2\left\langle q^2\right\rangle\right)\sigma_1+\left(-\tfrac{1}{2}k_1\left(k_1^2-k_2^2\right)+k_1\left\langle q^2\right\rangle\right)\sigma_2\right] \\
&= \gamma_D\left\langle q^2\right\rangle\left(k_2\sigma_1+k_1\sigma_2\right)+\gamma_D\tfrac{1}{2}\left(k_1^2-k_2^2\right)\left(k_2\sigma_1-k_1\sigma_2\right) \\
&= -\beta\left(k_2\sigma_1+k_1\sigma_2\right)+\gamma_D\tfrac{1}{2}\left(k_1^2-k_2^2\right)\left(k_2\sigma_1-k_1\sigma_2\right) \\
&\approx -\beta\left(k_2\sigma_1+k_1\sigma_2\right)
\end{aligned}
$$

A.2 (110) 面

由 $n_x=n_y=\frac{1}{\sqrt{2}}, n_z=0$ 可得

$$
\begin{aligned}
\left\langle\kappa_x\right\rangle &= k_x\left(k_y^2-k_z^2\right)+2n_x\left(k_yn_y-k_zn_z\right)\left\langle q^2\right\rangle+k_x\left(n_y^2-n_z^2\right)\left\langle q^2\right\rangle \\
&= k_x\left(k_y^2-k_z^2\right)+\left(\tfrac{1}{2}k_x+k_y\right)\left\langle q^2\right\rangle \\
\left\langle\kappa_y\right\rangle &= k_y\left(k_z^2-k_x^2\right)+2n_y\left(k_zn_z-k_xn_x\right)\left\langle q^2\right\rangle+k_y\left(n_z^2-n_x^2\right)\left\langle q^2\right\rangle \\
&= k_y\left(k_z^2-k_x^2\right)-\left(k_x+\tfrac{1}{2}k_y\right)\left\langle q^2\right\rangle \\
\left\langle\kappa_z\right\rangle &= k_z\left(k_x^2-k_y^2\right)+2n_z\left(k_xn_x-k_yn_y\right)\left\langle q^2\right\rangle+k_z\left(n_x^2-n_y^2\right)\left\langle q^2\right\rangle \\
&= k_z\left(k_x^2-k_y^2\right)
\end{aligned}
$$

建立固连于量子阱的新坐标系

$$
\begin{cases}
\mathbf{e}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathbf{e}_x-\mathbf{e}_y\right)\,||\,[\bar{1}10] \\
\mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_z\,||\,[001] \\
\mathbf{e}_3 = \mathbf{n}\,||\,[110]
\end{cases}
$$

得

$$
\begin{aligned}
\left\langle\kappa_1\right\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\left\langle\kappa_y\right\rangle-\left\langle\kappa_x\right\rangle\right) & k_x &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3-k_1\right) \\
\left\langle\kappa_2\right\rangle &= \left\langle\kappa_z\right\rangle & k_y &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3+k_1\right) \\
\left\langle\kappa_3\right\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\left\langle\kappa_x\right\rangle+\left\langle\kappa_y\right\rangle\right) & k_z &= k_2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\Rightarrow \\
\left\langle\kappa_x\right\rangle &= k_x\left(k_y^2-k_z^2\right)+\left(\tfrac{1}{2}k_x+k_y\right)\left\langle q^2\right\rangle \\
&= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3-k_1\right)\left[\tfrac{1}{2}\left(k_3+k_1\right)^2-k_2^2\right]+\left[\tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_3-k_1\right)+\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3+k_1\right)\right]\left\langle q^2\right\rangle \\
\left\langle\kappa_y\right\rangle &= k_y\left(k_z^2-k_x^2\right)-\left(k_x+\tfrac{1}{2}k_y\right)\left\langle q^2\right\rangle \\
&= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3+k_1\right)\left(k_2^2-\tfrac{1}{2}\left(k_3-k_1\right)^2\right)-\left[\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3-k_1\right)+\tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_3+k_1\right)\right]\left\langle q^2\right\rangle \\
\left\langle\kappa_z\right\rangle &= k_z\left(k_x^2-k_y^2\right) \\
&= k_2\left[\tfrac{1}{2}\left(k_3-k_1\right)^2-\tfrac{1}{2}\left(k_3+k_1\right)^2\right] \\
&= -2k_1k_2k_3
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow
$$

$$
\begin{aligned}
\langle\kappa_1\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\kappa_y\rangle - \langle\kappa_x\rangle\right) \\
&= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\{\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3+k_1\right)\left(k_2^2 - \tfrac{1}{2}\left(k_3-k_1\right)^2\right) - \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3-k_1\right)\left[\tfrac{1}{2}\left(k_3+k_1\right)^2 - k_2^2\right] \\
&\quad - \left[\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3-k_1\right) + \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_3+k_1\right)\right]\langle q^2\rangle - \left[\tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_3-k_1\right) + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3+k_1\right)\right]\langle q^2\rangle\} \\
&= \tfrac{1}{2}k_3\left(k_1^2 + 2k_2^2 - k_3^2 - 3\langle q^2\rangle\right) \\
\langle\kappa_2\rangle &= \langle\kappa_z\rangle \\
&= -2k_1k_2k_3 \\
\langle\kappa_3\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\kappa_x\rangle + \langle\kappa_y\rangle\right) \\
&= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\{\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3+k_1\right)\left(k_2^2 - \tfrac{1}{2}\left(k_3-k_1\right)^2\right) - \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3-k_1\right)\left[\tfrac{1}{2}\left(k_3+k_1\right)^2 - k_2^2\right] \\
&\quad - \left[\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3-k_1\right) + \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_3+k_1\right)\right]\langle q^2\rangle + \left[\tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_3-k_1\right) + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_3+k_1\right)\right]\langle q^2\rangle\} \\
&= \tfrac{1}{2}k_1\left(-k_1^2 + 2k_2^2 + k_3^2 + \langle q^2\rangle\right) \\
\Rightarrow & \\
H_D^{[110]} &= \gamma_D[\tfrac{1}{2}k_3\left(k_1^2 + 2k_2^2 - k_3^2 - 3\langle q^2\rangle\right)\sigma_1 - 2k_1k_2k_3\sigma_2 \\
&\quad + \tfrac{1}{2}k_1\left(-k_1^2 + 2k_2^2 + k_3^2 + \langle q^2\rangle\right)\sigma_3] \\
&= \tfrac{1}{2}\gamma_D\langle q^2\rangle k_1\sigma_3 - \gamma_D k_1\left(\tfrac{1}{2}k_1^2 - k_2^2\right)\sigma_3 \\
&= -\tfrac{1}{2}\beta k_1\sigma_3 - \gamma_D k_1\left(\tfrac{1}{2}k_1^2 - k_2^2\right)\sigma_3 \\
&\approx -\tfrac{1}{2}\beta k_1\sigma_3
\end{aligned}
$$

如果我们转动坐标系使得 x 轴转到原来的 y 轴方向，即 [001] 方向，而 y 轴转到原来的 -x 轴方向，即 $[1\bar{1}0]$ 方向，我们建立固连于量子阱的新坐标系

$$
\begin{cases}
\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_z \,||\, [001] \\
\mathbf{e}_2 = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y\right) \,||\, [1\bar{1}0] \\
\mathbf{e}_3 = \mathbf{n} \,||\, [110]
\end{cases}
$$

得

$$
\begin{aligned}
\langle\kappa_1\rangle &= \langle\kappa_z\rangle & k_x &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_2+k_3\right) \\
\langle\kappa_2\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\kappa_x\rangle - \langle\kappa_y\rangle\right) & k_y &= -\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(k_2-k_3\right) \\
\langle\kappa_3\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\kappa_x\rangle + \langle\kappa_y\rangle\right) & k_z &= k_1 \\
\Rightarrow & & & \\
\langle\kappa_x\rangle &= k_x\left(k_y^2 - k_z^2\right) + \left(\tfrac{1}{2}k_x + k_y\right)\langle q^2\rangle \\
&= \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_2+k_3\right)\left(\left(k_2-k_3\right)^2 - 2k_1^2\right) - \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_2-3k_3\right)\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_y\rangle &= k_y\left(k_z^2 - k_x^2\right) - \left(k_x + \tfrac{1}{2}k_y\right)\langle q^2\rangle \\
&= -\tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_2-k_3\right)\left(2k_1^2 - \left(k_2+k_3\right)^2\right) - \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(k_2+3k_3\right)\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_z\rangle &= k_z\left(k_x^2 - k_y^2\right) \\
&= 2k_1k_2k_3
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\Rightarrow \\
\langle\kappa_1\rangle &= \langle\kappa_z\rangle \\
&= 2k_1k_2k_3 \\
\langle\kappa_2\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\kappa_x\rangle - \langle\kappa_y\rangle\right) \\
&= \tfrac{1}{4}\left((k_2+k_3)\left((k_2-k_3)^2-2k_1^2\right)+(k_2-k_3)\left(2k_1^2-(k_2+k_3)^2\right)+6k_3\langle q^2\rangle\right) \\
&= \tfrac{1}{2}k_3\left(k_3^2-(2k_1^2+k_2^2)+3\langle q^2\rangle\right) \\
\langle\kappa_3\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\kappa_x\rangle + \langle\kappa_y\rangle\right) \\
&= \tfrac{1}{2}k_2\left(k_2^2-(2k_1^2+k_3^2)-\langle q^2\rangle\right) \\
&\Rightarrow \\
H_D^{[110]} &= \gamma_D\left[2k_1k_2k_3\sigma_1+\tfrac{1}{2}k_3\left(k_3^2-(2k_1^2+k_2^2)+3\langle q^2\rangle\right)\sigma_2+\tfrac{1}{2}k_2\left(k_2^2-(2k_1^2+k_3^2)-\langle q^2\rangle\right)\sigma_3\right] \\
&= \gamma_D\left[\tfrac{1}{2}k_2\left(k_2^2-2k_1^2-\langle q^2\rangle\right)\sigma_3\right] \\
&= \tfrac{1}{2}\beta k_2\sigma_3+\tfrac{1}{2}\gamma_D k_2\left(k_2^2-2k_1^2\right)\sigma_3 \\
&\approx \tfrac{1}{2}\beta k_2\sigma_3
\end{aligned}
$$

A.3 (111) 面

由 $n_x=n_y=n_z=\frac{1}{\sqrt{3}}$, 可得

$$
\begin{aligned}
\langle\kappa_x\rangle &= k_x\left(k_y^2-k_z^2\right)+2n_x\left(k_yn_y-k_zn_z\right)\langle q^2\rangle+k_x\left(n_y^2-n_z^2\right)\langle q^2\rangle \\
&= k_x\left(k_y^2-k_z^2\right)+\tfrac{2}{3}\left(k_y-k_z\right)\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_y\rangle &= k_y\left(k_z^2-k_x^2\right)+2n_y\left(k_zn_z-k_xn_x\right)\langle q^2\rangle+k_y\left(n_z^2-n_x^2\right)\langle q^2\rangle \\
&= k_y\left(k_z^2-k_x^2\right)+\tfrac{2}{3}\left(k_z-k_x\right)\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_z\rangle &= k_z\left(k_x^2-k_y^2\right)+2n_z\left(k_xn_x-k_yn_y\right)\langle q^2\rangle+k_z\left(n_x^2-n_y^2\right)\langle q^2\rangle \\
&= k_z\left(k_x^2-k_y^2\right)+\tfrac{2}{3}\left(k_x-k_y\right)\langle q^2\rangle
\end{aligned}
$$

建立固连于量子阱的新坐标系,

$$
\begin{cases}
\mathbf{e}_1 = \tfrac{1}{\sqrt{6}}\left(\mathbf{e}_x+\mathbf{e}_y-2\mathbf{e}_z\right)\,||\,\left[11\overline{2}\right] \\
\mathbf{e}_2 = -\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathbf{e}_x-\mathbf{e}_y\right)\,||\,\left[\overline{1}10\right] \\
\mathbf{e}_3 = \mathbf{n}\,||\,[111]
\end{cases}
$$

得

$$
\begin{aligned}
\langle\kappa_1\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{6}}\left(\langle\kappa_x\rangle+\langle\kappa_y\rangle-2\langle\kappa_z\rangle\right) & k_x &= \tfrac{1}{\sqrt{6}}k_1-\tfrac{1}{\sqrt{2}}k_2+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3 \\
\langle\kappa_2\rangle &= -\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\kappa_x\rangle-\langle\kappa_y\rangle\right) & k_y &= \tfrac{1}{\sqrt{6}}k_1+\tfrac{1}{\sqrt{2}}k_2+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3 \\
\langle\kappa_3\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left(\langle\kappa_x\rangle+\langle\kappa_y\rangle+\langle\kappa_z\rangle\right) & k_z &= -\tfrac{2}{\sqrt{6}}k_1+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow$

$$
\begin{aligned}
\langle\kappa_x\rangle = &\ k_x\left(k_y^2-k_z^2\right)+\tfrac{2}{3}\left(k_y-k_z\right)\langle q^2\rangle \\
= &\ \left(\tfrac{1}{\sqrt{6}}k_1-\tfrac{1}{\sqrt{2}}k_2+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3\right)\left[\left(\tfrac{1}{\sqrt{6}}k_1+\tfrac{1}{\sqrt{2}}k_2+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3\right)^2-\left(-\tfrac{2}{\sqrt{6}}k_1+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3\right)^2\right] \\
&+\tfrac{2}{3}\left(\tfrac{3}{\sqrt{6}}k_1+\tfrac{1}{\sqrt{2}}k_2\right)\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_y\rangle = &\ k_y\left(k_z^2-k_x^2\right)+\tfrac{2}{3}\left(k_z-k_x\right)\langle q^2\rangle \\
= &\ \left(\tfrac{1}{\sqrt{6}}k_1+\tfrac{1}{\sqrt{2}}k_2+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3\right)\left[\left(-\tfrac{2}{\sqrt{6}}k_1+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3\right)^2-\left(\tfrac{1}{\sqrt{6}}k_1-\tfrac{1}{\sqrt{2}}k_2+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3\right)^2\right] \\
&+\tfrac{2}{3}\left(-\tfrac{3}{\sqrt{6}}k_1+\tfrac{1}{\sqrt{2}}k_2\right)\langle q^2\rangle \\
\langle\kappa_z\rangle = &\ k_z\left(k_x^2-k_y^2\right)+\tfrac{2}{3}\left(k_x-k_y\right)\langle q^2\rangle \\
= &\ \left(-\tfrac{2}{\sqrt{6}}k_1+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3\right)\left[\left(\tfrac{1}{\sqrt{6}}k_1-\tfrac{1}{\sqrt{2}}k_2+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3\right)^2-\left(\tfrac{1}{\sqrt{6}}k_1+\tfrac{1}{\sqrt{2}}k_2+\tfrac{1}{\sqrt{3}}k_3\right)^2\right] \\
&-\tfrac{2\sqrt{2}}{3}k_2\langle q^2\rangle \\
\Rightarrow & \\
\langle\kappa_1\rangle = &\ \tfrac{1}{\sqrt{6}}\left(\langle\kappa_x\rangle+\langle\kappa_y\rangle-2\langle\kappa_z\rangle\right) \\
= &\ -\tfrac{1}{2\sqrt{3}}k_2\left(k_1^2+k_2^2-4k_3^2+2\sqrt{2}k_1k_3-4\langle q^2\rangle\right) \\
\langle\kappa_2\rangle = &\ -\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\kappa_x\rangle-\langle\kappa_y\rangle\right) \\
= &\ -\tfrac{1}{2\sqrt{3}}\left(-k_1^3+\sqrt{2}k_1^2k_3-k_1k_2^2+4k_1k_3^2-\sqrt{2}k_2^2k_3+4k_1\langle q^2\rangle\right) \\
\langle\kappa_3\rangle = &\ \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left(\langle\kappa_x\rangle+\langle\kappa_y\rangle+\langle\kappa_z\rangle\right) \\
= &\ \tfrac{1}{\sqrt{6}}k_2\left(3k_1^2-k_2^2\right) \\
\Rightarrow & \\
H_D^{[111]} = &\ \gamma_D[-\tfrac{1}{2\sqrt{3}}k_2\left(k_1^2+k_2^2-4k_3^2+2\sqrt{2}k_1k_3-4\langle q^2\rangle\right)\sigma_1 \\
&-\tfrac{1}{2\sqrt{3}}\left(-k_1^3+\sqrt{2}k_1^2k_3-k_1k_2^2+4k_1k_3^2-\sqrt{2}k_2^2k_3+4k_1\langle q^2\rangle\right)\sigma_2 \\
&+\tfrac{1}{\sqrt{6}}k_2\left(3k_1^2-k_2^2\right)\sigma_3] \\
= &\ \gamma_D[-\tfrac{1}{2\sqrt{3}}\left(k_1^2k_2+k_2^3-4k_2\langle q^2\rangle\right)\sigma_1-\tfrac{1}{2\sqrt{3}}\left(-k_1^3-k_1k_2^2+4k_1\langle q^2\rangle\right)\sigma_2 \\
&+\tfrac{1}{\sqrt{6}}k_2\left(3k_1^2-k_2^2\right)\sigma_3] \\
= &\ \beta\left[\tfrac{2}{\sqrt{3}}k_1\sigma_2-\tfrac{2}{\sqrt{3}}k_2\sigma_1\right]+\gamma_D[-\tfrac{1}{2\sqrt{3}}\left(k_1^2k_2+k_2^3\right)\sigma_1+\tfrac{1}{2\sqrt{3}}\left(k_1^3+k_1k_2^2\right)\sigma_2 \\
&+\tfrac{1}{\sqrt{6}}k_2\left(3k_1^2-k_2^2\right)\sigma_3] \\
\approx &\ \tfrac{2}{\sqrt{3}}\beta\left[k_1\sigma_2-k_2\sigma_1\right]
\end{aligned}
$$

附录 B　利用非平衡格林函数导出 RKKY 相互作用公式

我们利用非平衡格林函数从系统总哈密顿量中导出 RKKY 相互作用的计算公式：

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_i \\ H_i &= -J \sum_{p=1,2;\alpha,\beta} \sigma_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{S}_p \int dx \Psi_\alpha^\dagger (x) \delta (x - x_p) \Psi_\beta (x) \end{aligned}$$

两局域自旋间的 RKKY 相互作用可以受传导电子影响的局域自旋能量的微扰计算中得出，我们只计算到最低阶交换贡献。无论是平衡态还是非平衡态，系统的能量都可以由期待值 $\langle H_i \rangle_{(1ex)}$ 给出，其中上标 $(1ex)$ 表示在做平均时只考虑第一阶交换贡献。

因此人们可以等效地计算第一个自旋对第二个自旋处传导电子自旋密度做一阶微扰，或者反之。总相互作用能是这两项贡献之和。

$$\begin{aligned} H_{RKKY} &= \langle H_i \rangle_{(1ex)} \\ &= -J \sum_{p=1,2} \mathbf{S}_p \cdot \Delta\rho_{(1ex)} (x_p) \end{aligned}$$

$$\Delta\rho_{(1ex)} (x_p) = \sum_{\alpha,\beta} \sigma_{\alpha\beta} \langle n_{\alpha\beta} (x_p) \rangle_{(1ex)} , (p \in \{1,2\})$$

电子关联函数为 $-iG^<_{\alpha\beta} (x,t;x',0) = \left\langle \Psi_\alpha^\dagger (x',0) \Psi_\beta (x,t) \right\rangle$，空穴关联函数为 $iG^>_{\alpha\beta} (x,t;x',0) = \left\langle \Psi_\beta (x,t) \Psi_\alpha^\dagger (x',0) \right\rangle$.

由此我们得

$$\begin{aligned} \langle n_{\alpha\beta} (x) \rangle &= \left\langle \Psi_\alpha^\dagger (x) \Psi_\beta (x) \right\rangle \\ &= -i \lim_{t \longrightarrow 0, x' \longrightarrow x} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega t} G^<_{\alpha\beta} (x,x',\omega) \end{aligned}$$

利用 $G^<$ 的定义，我们可以看出这个表达式等价于粒子密度与推迟格林函数 G^r 的一般关系式，

$$\langle n_{\alpha\beta} (x) \rangle = -\frac{1}{\pi} \lim_{x' \longrightarrow x} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F (\omega) \operatorname{Im} \left[G^r_{\alpha\beta} (x,x';\omega) \right]$$

无局域自旋的非微扰系统的格林函数矩阵为

$$\mathbf{G}\left(x,x';t\right)=\begin{pmatrix}G^{t}\left(x,x';t\right) & -G^{<}\left(x,x';t\right)\\ G^{>}\left(x,x';t\right) & -G^{\tilde{t}}\left(x,x';t\right)\end{pmatrix}$$

矩阵相对耦合 J 做一阶微扰展开得

$$G^{<}_{(1ex)\alpha\beta}\left(x_1,x_1;\omega\right)=-J\sigma_{\alpha\beta}\cdot\mathbf{S}_2\left[G^{r}_{(0)\alpha\alpha}\left(x_1,x_2;\omega\right)G^{<}_{(0)\beta\beta}\left(x_2,x_1;\omega\right)+G^{<}_{(0)\alpha\alpha}\left(x_1,x_2;\omega\right)G^{a}_{(0)\beta\beta}\left(x_2,x_1;\omega\right)\right]$$

然后我们得

$$\begin{aligned}H_{RKKY} &= -J\sum_{p=1,2}\sum_{\alpha,\beta}\mathbf{S}_p\cdot\sigma_{\alpha\beta}\left\langle n_{\alpha\beta}\left(x_p\right)\right\rangle_{(1ex)}\\ &= 2J^2\mathrm{Tr}\left(\mathbf{S}_1\cdot\sigma_1\right)\left(\mathbf{S}_2\cdot\sigma_2\right)\\ &\quad\times\left(\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\left[G^{r}_{(0)}\left(x_1,x_2;\omega\right)G^{<}_{(0)}\left(x_2,x_1;\omega\right)+G^{<}_{(0)}\left(x_1,x_2;\omega\right)G^{a}_{(0)}\left(x_2,x_1;\omega\right)\right]\right)\end{aligned}$$

在平衡态情形，我们很容易使方程回到常见的形式

$$\begin{aligned}H_{RKKY} &= -J\sum_{p=1,2}\sum_{\alpha,\beta}\mathbf{S}_p\cdot\sigma_{\alpha\beta}\left\langle n_{\alpha\beta}\left(x_p\right)\right\rangle_{(1ex)}\\ &= \frac{1}{\pi}2J^2\mathrm{Tr}\left(\mathbf{S}_1\cdot\sigma_1\right)\left(\mathbf{S}_2\cdot\sigma_2\right)\int_{-\infty}^{\infty}d\omega n_F\left(\omega\right)\mathrm{Im}\left[G^{r}_{(0)}\left(x_1,x_2;\omega\right)G^{r}_{(0)}\left(x_2,x_1;\omega\right)\right]\end{aligned}$$

如果初始格林函数是显含自旋的，那么我们可以把公式改写为

$$\begin{aligned}H^{eq}_{RKKY} &= \frac{2}{\pi}\mathrm{Im}J^2\int_{-\infty}^{\varepsilon_F}d\varepsilon\mathrm{Tr}\left[\left(\mathbf{S}_1\cdot\sigma_1\right)G^{r}_{(0)}\left(\mathbf{R}_{12},\varepsilon\right)\left(\mathbf{S}_2\cdot\sigma_2\right)G^{r}_{(0)}\left(-\mathbf{R}_{12},\varepsilon\right)\right]\\ H^{neq}_{RKKY} &= \frac{1}{\pi}\mathrm{Im}J^2\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon\mathrm{Tr}[\left(\mathbf{S}_1\cdot\sigma_1\right)G^{r}_{(0)}\left(\mathbf{R}_{12},\varepsilon\right)\left(\mathbf{S}_2\cdot\sigma_2\right)G^{<}_{(0)}\left(-\mathbf{R}_{12},\varepsilon\right)\\ &\quad+\left(\mathbf{S}_1\cdot\sigma_1\right)G^{<}_{(0)}\left(\mathbf{R}_{12},\varepsilon\right)\left(\mathbf{S}_2\cdot\sigma_2\right)G^{a}_{(0)}\left(-\mathbf{R}_{12},\varepsilon\right)]\end{aligned}$$

附录 C　实验室坐标系下 RKKY 相互作用形式与有效磁场坐标系下的转换

在原实验室坐标系下，RKKY 相互作用的形式和有效磁场分别为

$$\begin{aligned} H_{1,2}^{RKKY} = & F_1\left(|R_{12}|\right)\left\{\left[\sin^2\varphi+\cos^2\varphi\cos 2\theta\right]S_1^xS_2^x+\left[\cos^2\varphi+\sin^2\varphi\cos 2\theta\right]S_1^yS_2^y\right. \\ & +\cos 2\theta S_1^zS_2^z+\cos\varphi\sin 2\theta(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2)_y+\sin\varphi\sin 2\theta(\mathbf{S}_1\times\mathbf{S}_2)_x \\ & \left.+\sin 2\varphi\sin^2\theta\left(S_1^xS_2^y+S_1^yS_2^x\right)\right\} \\ = & F_1\left(|R_{12}|\right)\left\{\left[\sin^2\varphi+\cos^2\varphi\cos 2\theta\right]S_1^xS_2^x+\left[\cos^2\varphi+\sin^2\varphi\cos 2\theta\right]S_1^yS_2^y\right. \\ & +\cos 2\theta S_1^zS_2^z+\cos\varphi\sin 2\theta\left(S_1^zS_2^x-S_1^xS_2^z\right)+\sin\varphi\sin 2\theta\left(S_1^yS_2^z-S_1^zS_2^y\right) \\ & \left.+\sin 2\varphi\sin^2\theta\left(S_1^xS_2^y+S_1^yS_2^x\right)\right\} \\ \mathbf{B}_{\text{eff}}^{[001]}(k) = & (\beta k,-\alpha k,0) \end{aligned}$$

我们看到，有效磁场完全在垂直于 z 轴的面内，其方向并不随 k 的变化而变化，我们以有效磁场方向为 $-z'$ 轴建立新坐标系。

先绕原 z 轴转 $\frac{\pi}{2}+\varphi$ 角，再绕 y 轴转 $\frac{\pi}{2}$ 角，继而得转动矩阵

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \end{pmatrix}$$

作用到原坐标轴上，得

$$\begin{cases} x' = & z \\ y' = & x\cos\varphi-y\sin\varphi \\ z' = & x\sin\varphi+y\cos\varphi \end{cases},$$

反解得

$$\begin{cases} x = & y'\cos\varphi+z'\sin\varphi \\ y = & -y'\sin\varphi+z'\cos\varphi \\ z = & x' \end{cases}$$

从而有 $\begin{cases} S_1^x = & S_1^{y'}\cos\varphi+S_1^{z'}\sin\varphi \\ S_1^y = & -S_1^{y'}\sin\varphi+S_1^{z'}\cos\varphi \\ S_1^z = & S_1^{x'} \end{cases}$ 和 $\begin{cases} S_2^x = & S_2^{y'}\cos\varphi+S_2^{z'}\sin\varphi \\ S_2^y = & -S_2^{y'}\sin\varphi+S_2^{z'}\cos\varphi \\ S_2^z = & S_2^{x'} \end{cases}$

代入原坐标系下的 RKKY 相互作用的形式，得

$$
\begin{aligned}
H_{1,2}^{RKKY} = & F_1(|R_{12}|)\{\left(\sin^2\varphi+\cos^2\varphi\cos 2\theta\right)S_1^xS_2^x+\left(\cos^2\varphi+\sin^2\varphi\cos 2\theta\right)S_1^yS_2^y \\
& +\cos 2\theta S_1^zS_2^z+\cos\varphi\sin 2\theta\left(S_1^zS_2^x-S_1^xS_2^z\right)+\sin\varphi\sin 2\theta\left(S_1^yS_2^z-S_1^zS_2^y\right) \\
& +\sin 2\varphi\sin^2\theta\left(S_1^xS_2^y+S_1^yS_2^x\right)\} \\
= & F_1(|R_{12}|)\{\left[\sin^2\varphi+\cos^2\varphi\cos 2\theta\right]\left(S_1^{x'}\cos\varphi-S_1^{y'}\sin\varphi\right)\left(S_2^{x'}\cos\varphi-S_2^{y'}\sin\varphi\right) \\
& +\left[\cos^2\varphi+\sin^2\varphi\cos 2\theta\right]\left(S_1^{x'}\sin\varphi+S_1^{y'}\cos\varphi\right)\left(S_2^{x'}\sin\varphi+S_2^{y'}\cos\varphi\right) \\
& +\cos 2\theta S_1^zS_2^z+\cos\varphi\sin 2\theta[S_1^z\left(S_2^{x'}\cos\varphi-S_2^{y'}\sin\varphi\right) \\
& -\left(S_1^{x'}\cos\varphi-S_1^{y'}\sin\varphi\right)S_2^z]+\sin\varphi\sin 2\theta[\left(S_1^{x'}\sin\varphi+S_1^{y'}\cos\varphi\right)S_2^z \\
& -S_1^z\left(S_2^{x'}\sin\varphi+S_2^{y'}\cos\varphi\right)]+\sin 2\varphi\sin^2\theta[\left(S_1^{x'}\cos\varphi-S_1^{y'}\sin\varphi\right) \\
& \times\left(S_2^{x'}\sin\varphi+S_2^{y'}\cos\varphi\right)+\left(S_1^{x'}\sin\varphi+S_1^{y'}\cos\varphi\right)\left(S_2^{x'}\cos\varphi-S_2^{y'}\sin\varphi\right)]\} \\
= & F_1(|R_{12}|)\left\{\cos 2\theta\left(S_1^{x'}S_2^{x'}+S_1^{y'}S_2^{y'}\right)+S_1^{z'}S_2^{z'}+\sin 2\theta\left(S_1^{x'}S_2^{y'}-S_1^{y'}S_2^{x'}\right)\right\} \\
= & F_1(|R_{12}|)\left\{\tfrac{e^{i2\theta}+e^{-i2\theta}}{2}\left(S_1^{x'}S_2^{x'}+S_1^{y'}S_2^{y'}\right)+S_1^{z'}S_2^{z'}+i\tfrac{-e^{i2\theta}+e^{-i2\theta}}{2}\left(S_1^{x'}S_2^{y'}-S_1^{y'}S_2^{x'}\right)\right\} \\
= & F_1(|R_{12}|)\{\left(S_1^{x'}+iS_1^{y'}\right)\left(S_2^{x'}-iS_2^{y'}\right)\tfrac{e^{i2\theta}}{2}+S_1^{z'}S_2^{z'} \\
& +\left(S_1^{x'}-iS_1^{y'}\right)\left(S_2^{x'}+iS_2^{y'}\right)\tfrac{e^{-i2\theta}}{2}\} \\
= & F_1(|R_{12}|)\left\{S_1^{z'}S_2^{z'}+\tfrac{1}{2}S_1^+S_2^-e^{i2\theta}+\tfrac{1}{2}S_1^-S_2^+e^{-i2\theta}\right\}
\end{aligned}
$$

这里，$\theta\equiv k_+|R_{12}|$，从而转换到了有效磁场坐标系下。

但是，上面这种结果在形式上并非是最简的，因为它实际上还包含了一个 DM 项 $\left(S_1^{x'}S_2^{y'}-S_1^{y'}S_2^{x'}\right)$，转动不同的角度，我们可以得到更简单的形式：

以有效磁场方向为 z' 轴建立新坐标系，先绕原 z 轴转 $\frac{3\pi}{2}+\varphi$ 角，再绕 y 轴转 $\frac{\pi}{2}$ 角，继而得转动矩阵

$$
\begin{pmatrix}
\cos\frac{\pi}{2}\cos\left(\frac{3\pi}{2}+\varphi\right) & \cos\frac{\pi}{2}\sin\left(\frac{3\pi}{2}+\varphi\right) & \sin\frac{\pi}{2} \\
\sin\left(\frac{3\pi}{2}+\varphi\right) & \cos\left(\frac{3\pi}{2}+\varphi\right) & 0 \\
-\sin\frac{\pi}{2}\cos\left(\frac{3\pi}{2}+\varphi\right) & \sin\frac{\pi}{2}\sin\left(\frac{3\pi}{2}+\varphi\right) & \cos\frac{\pi}{2}
\end{pmatrix}
=\begin{pmatrix}
0 & 0 & 1 \\
-\cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\
-\sin\varphi & -\cos\varphi & 0
\end{pmatrix}
$$

作用到原坐标轴上，得

$$
\begin{cases}
x' = & z \\
y' = & -x\cos\varphi+y\sin\varphi \\
z' = & -x\sin\varphi-y\cos\varphi
\end{cases},
$$

反解得

$$
\begin{cases}
x = & -y'\cos\varphi-z'\sin\varphi \\
y = & y'\sin\varphi-z'\cos\varphi \\
z = & x'
\end{cases}
$$

从而有

$$\begin{cases} S_1^x = & -S_1^{y'}\cos\varphi - S_1^{z'}\sin\varphi \\ S_1^y = & S_1^{y'}\sin\varphi - S_1^{z'}\cos\varphi \\ S_1^z = & S_1^{x'} \end{cases} \text{和} \begin{cases} S_2^x = & -S_2^{y'}\cos\varphi - S_2^{z'}\sin\varphi \\ S_2^y = & S_2^{y'}\sin\varphi - S_2^{z'}\cos\varphi \\ S_2^z = & S_2^{x'} \end{cases}$$

代入原坐标系下的 RKKY 相互作用的形式，得

$$\begin{aligned} H_{1,2}^{RKKY} = & F_1(|R_{12}|)\{\left(\sin^2\varphi + \cos^2\varphi\cos 2\theta\right) S_1^x S_2^x + \left(\cos^2\varphi + \sin^2\varphi\cos 2\theta\right) S_1^y S_2^y \\ & + \cos 2\theta S_1^z S_2^z + \cos\varphi\sin 2\theta\left(S_1^z S_2^x - S_1^x S_2^z\right) + \sin\varphi\sin 2\theta\left(S_1^y S_2^z - S_1^z S_2^y\right) \\ & + \sin 2\varphi\sin^2\theta\left(S_1^x S_2^y + S_1^y S_2^x\right)\} \\ = & F_1(|R_{12}|)\{\left[\sin^2\varphi + \cos^2\varphi\cos 2\theta\right]\left(-S_1^{y'}\cos\varphi - S_1^{z'}\sin\varphi\right) \\ & \times\left(-S_2^{y'}\cos\varphi - S_2^{z'}\sin\varphi\right) + \left[\cos^2\varphi + \sin^2\varphi\cos 2\theta\right] \\ & \times\left(S_1^{y'}\sin\varphi - S_1^{z'}\cos\varphi\right)\left(S_2^{y'}\sin\varphi - S_2^{z'}\cos\varphi\right) + \cos 2\theta S_1^{x'} S_2^{x'} \\ & + \cos\varphi\sin 2\theta\left[S_1^{x'}\left(-S_2^{y'}\cos\varphi - S_2^{z'}\sin\varphi\right) - \left(-S_1^{y'}\cos\varphi - S_1^{z'}\sin\varphi\right) S_2^{x'}\right] \\ & + \sin\varphi\sin 2\theta\left[\left(S_1^{y'}\sin\varphi - S_1^{z'}\cos\varphi\right) S_2^{x'} - S_1^{x'}\left(S_2^{y'}\sin\varphi - S_2^{z'}\cos\varphi\right)\right] \\ & + \sin 2\varphi\sin^2\theta[\left(-S_1^{y'}\cos\varphi - S_1^{z'}\sin\varphi\right)\left(S_2^{y'}\sin\varphi - S_2^{z'}\cos\varphi\right) \\ & + \left(S_1^{y'}\sin\varphi - S_1^{z'}\cos\varphi\right)\left(-S_2^{y'}\cos\varphi - S_2^{z'}\sin\varphi\right)]\} \\ = & F_1(|R_{12}|)\left\{(\cos 2\theta + \sin 2\theta) S_1^{x'} S_2^{x'} + (\cos 2\theta - \sin 2\theta) S_1^{y'} S_2^{y'} + S_1^{z'} S_2^{z'}\right\} \end{aligned}$$

附录 D　(111) 晶面中为达到可控参数条件所需的外加电场强度

基本能量尺度我们取为 $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m^* a^2}$，这里 a 为长度尺度，我们取 $100nm$.

以下参数的出处：GaAs、InAs、InSb 的 m^*, γ_D, γ_R 出自 Romano 等的文献 [1]，$Hg_{0.74}Cd_{0.26}Te$ 的 m^* 由 HgTe、CdTe 材料参数内插求得，利用公式

$$\frac{m_0}{m_e^*} = 1 + 2F + \frac{2E_p}{3E_g} + \frac{E_p}{3(E_g + \Delta)}$$

其中 HgTe 参数为：

E_g^Γ	Δ	E_p	F
-0.303	1.0	19.0	-0.8

CdTe 参数为：

E_g^Γ	Δ	E_p	F
1.606	1.0	19.0	-0.8

$Hg_{0.74}Cd_{0.26}Te$ 的 γ_R 由 Yang 等文献 [2] 中 Rashba 自旋劈裂求得，利用公式

$$\begin{aligned} \Delta E &= 2\alpha k_{\parallel} \\ \alpha &= \gamma_R e \langle \frac{\partial V}{\partial z} \rangle \end{aligned}$$

D.1　GaAs

GaAs 的电子有效质量 $m^* = 0.067 m_e$，$E_0 = 0.057 meV$。

我们知道 Dresselhaus 自旋轨道耦合强度 β 满足下面关系

$$\beta = \gamma_D \langle k_z^2 \rangle \approx \gamma_D \left(\frac{\pi}{z_0} \right)^2$$

而 $\gamma_D = 24 eV\text{Å}^3$，所以 $\beta \approx 23.6 meV\text{Å}$，$z_0$ 取为 $10nm$

无量纲化的 $\overline{\beta}=\frac{\beta}{E_0 a}=\frac{23.6meV\text{Å}}{0.057meV\times 1000\text{Å}}\approx 0.42$

Rashba 自旋轨道耦合强度 α 满足下面关系

$$\alpha=\gamma_R e\langle\frac{\partial V}{\partial z}\rangle$$

设 $R_{12}=100nm$，则 $\overline{R}_{12}=\frac{R_{12}}{a}=1$

又因为有

$$\frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\beta-\alpha\right)R_{12}=k\pi, k\in \mathrm{Z}$$

无量纲化后为

$$\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\overline{\beta}-\overline{\alpha}\right)\overline{R}_{12}=2k\pi, k\in \mathrm{Z} \tag{D.1}$$

取 $k=0$, 有 $\overline{\alpha}=\frac{2}{\sqrt{3}}\overline{\beta}\approx 0.485, \alpha=\overline{\alpha}E_0 a\simeq 0.0276eV\text{Å}, \gamma_R=5.33\text{Å}^2$

$$\langle\frac{\partial V}{\partial z}\rangle=\frac{\alpha}{e\gamma_R}=\frac{0.0276eV\text{Å}}{e\times 5.33\text{Å}^2}\approx 0.00519V/\text{Å}=519kV/cm$$

这里，我们注意到当取 $k=0$ 时，φ 满足（1）式的条件不再包括 $\overline{R}$ 的影响，即无论两局域自旋距离多远，只要 α 和 β 符合一定关系，就满足（1）式。

取 $k=-1$, 有 $\overline{\alpha}=\frac{2}{\sqrt{3}}\overline{\beta}+\frac{2\pi}{R_{12}}\approx 6.77, \alpha=\overline{\alpha}E_0 a\simeq 0.386eV\text{Å}, \gamma_R=5.33\text{Å}^2$

$$\langle\frac{\partial V}{\partial z}\rangle=\frac{\alpha}{e\gamma_R}=\frac{0.386eV\text{Å}}{e\times 5.33\text{Å}^2}\approx 0.0724V/\text{Å}=7240kV/cm$$

D.2 InAs

InAs 的电子有效质量 $m^*=0.027m_e$，$E_0=0.141meV$。

$\gamma_D=130eV\text{Å}^3$，所以 $\beta\approx 130meV\text{Å}$，$z_0$ 取为 $10nm$

无量纲化的 $\overline{\beta}=\frac{\beta}{E_0 a}=\frac{130meV\text{Å}}{0.141meV\times 1000\text{Å}}\approx 0.922$

设 $R_{12}=100nm$，则 $\overline{R}_{12}=\frac{R_{12}}{a}=1$

取 $k=0$, 有 $\overline{\alpha}=\frac{2}{\sqrt{3}}\overline{\beta}\approx 1.065, \alpha=\overline{\alpha}E_0 a\simeq 0.150eV\text{Å}, \gamma_R=110\text{Å}^2$

$$\langle\frac{\partial V}{\partial z}\rangle=\frac{\alpha}{e\gamma_R}=\frac{0.150eV\text{Å}}{e\times 110\text{Å}^2}\approx 0.00136V/\text{Å}=136kV/cm$$

D.3　InSb

InSb 的电子有效质量 $m^* = 0.013m_e$，$E_0 = 0.294meV$。

$\gamma_D = 220eV\text{Å}^3$，所以 $\beta \approx 220meV\text{Å}$，$z_0$ 取为 $10nm$

无量纲化的 $\overline{\beta} = \frac{\beta}{E_0 a} = \frac{220meV\text{Å}}{0.294meV \times 1000\text{Å}} \approx 0.748$

设 $R_{12} = 100nm$，则 $\overline{R}_{12} = \frac{R_{12}}{a} = 1$

取 $k = 0$, 有 $\overline{\alpha} = \frac{2}{\sqrt{3}}\overline{\beta} \approx 0.864, \alpha = \overline{\alpha}E_0 a \simeq 0.254eV\text{Å}, \gamma_R = 500\text{Å}^2$

$$\langle\frac{\partial V}{\partial z}\rangle = \frac{\alpha}{e\gamma_R} = \frac{0.254eV\text{Å}}{e \times 500\text{Å}^2} \approx 0.00051V/\text{Å} = 51kV/cm$$

D.4　$Hg_{0.74}Cd_{0.26}Te$

$Hg_{0.74}Cd_{0.26}Te$ 的电子有效质量 $m^* = 0.014m_e$，$E_0 = 0.269meV$。

取无量纲化的 $\overline{\beta} \approx 1$

设 $R_{12} = 100nm$，则 $\overline{R}_{12} = \frac{R_{12}}{a} = 1$

取 $k = 0$, 有 $\overline{\alpha} = \frac{2}{\sqrt{3}}\overline{\beta} \approx 1.155, \alpha = \overline{\alpha}E_0 a \simeq 0.311eV\text{Å}, \gamma_R \approx 400\text{Å}^2$

$$\langle\frac{\partial V}{\partial z}\rangle = \frac{\alpha}{e\gamma_R} = \frac{0.311eV\text{Å}}{e \times 400\text{Å}^2} \approx 0.00078V/\text{Å} = 78kV/cm$$

参考文献

[1] C. L. Romano, S. E. Ulloa and P. I. Tamborenea, Level structure and spin-orbit effects in quasi-one-dimensional semiconductor nanostructures, Phys. Rev. B **71**, 035336 (2005).

[2] W. Yang and Kai Chang, Nonlinear Rashba model and spin relaxation in quantum wells, Phys. Rev. B **74**, 193314(2006).

发表文章目录

[1] Jia-Ji Zhu, Kai Chang, Ren-Bao Liu, and Hai-Qing Lin. Electrically controllable RKKY interaction in semiconductor quantum wires. *Phys. Rev. B*, 81(11):113302–3, 2010.

[2] Jia-Ji Zhu, Dao-Xin Yao, Shou-Cheng Zhang, and Kai Chang. Electrically controllable surface magnetism on the surface of topological insulators. *Phys. Rev. Lett.*, 106(9):097201–2, 2011.

[3] Jia-Ji Zhu, François M. Peeters, Kai Chang. Gate-controlled magnetism in graphene p-n junctions. (to be submitted)

致　　谢

本文是在我的导师常凯研究员的悉心指导和亲切关怀下完成的。常老师学识渊博、治学严谨、思维敏捷、视野开阔，他那精益求精的工作态度、锲而不舍的探究精神、不断进取的人生哲学都在潜移默化中教育了我，不仅令我在学术上受益匪浅，而且在人生道路上为我树立了一个标杆。因为一个偶然的原因，我早在北师大攻读硕士时就来到了半导体所追随常老师做研究。刚到常老师身边时，我对何为科研还一窍不通，是常老师循循善诱，领我一步步走近了科学的殿堂。常常我百思不得其解的问题，常老师一个简单的提示就会令我豁然开朗；常常一个看似枯燥乏味的课题，常老师一句幽默的玩笑就能揭示出其中令人激动的物理，以至于有时我也会像颜渊一样感叹——“仰之弥高，钻之弥坚，瞻之在前，忽焉在后”！追随常老师研究的这些年，如果说我有一些进步和成绩的话，那完全是常老师在我身上所耗费的心血和汗水。常老师不仅在学术上对我谆谆教诲，在生活上对我也同样关怀备至。每当我在生活上遇到困难和挫折时，常老师都会耐心地勉励我。尽管在工作上常老师从来都是严格要求学生，但在生活上却非常宽厚随和。有时常老师对我的宽容与照顾，甚至让我自己都感到惊讶，更是感动。常老师在学业上对我的细致的指导、在生活上给予我的热心的帮助，是本论文得以顺利完成的最重要的因素。

感谢我的第二导师比利时安特卫普大学 F. M. Peeters 教授对我在比利时安特卫普大学期间的热心指导和帮助。

感谢北京师范大学宋筠副教授在研究拓扑绝缘体表面态上 RKKY 相互作用诱导的自旋波方面给予的指导，感谢半导体所超晶格室吴晓光研究员、吴南健研究员以及所里其他老师平日里对我的支持与帮助。

在半导体所和安特卫普大学，我都结识了很多同学，结下了深厚的友谊，他们在学业和生活上对我的无私帮助令我感铭于心——感谢已经毕业的同门师兄王立国、杨文，感谢组里的同窗盛劲松、李晓静、张振中、刘江涛、王淼、李俊、张乐波、刘羽、吴振华、娄文凯、张东、施李坤、林亮中、孙金芳，感谢安特卫普大学的好友陈亚江、徐贲、敖志敏、李斌等。其中特别要感谢李俊在学业和生活方面、刘羽在工作方面、张乐波在生活方面以及徐贲和陈亚江在我居留安特卫普时给予我的珍贵帮助！

还要感谢我的大舅宋明蔚先生，我在北京求学的十二年里他对我的关心与照顾始终如一，对我的帮助数不胜数，他的关心与勉励是我坚持和进取的动力。

最后，要感谢我的未婚妻李彦青对我的不离不弃、默默支持，以及在生活中无微不至的关怀，让我能全身心投入到科研事业中。

谨以此文献给我敬爱的父母！