

# 自旋 – 轨道耦合系统中的自旋流定义\*

施均仁<sup>1,†</sup> 张平<sup>2</sup> 肖笛<sup>3</sup> 牛谦<sup>3</sup>

(1 中国科学院物理研究所国际量子结构中心 北京 100080)

(2 北京应用物理与计算数学研究所 北京 100088)

(3 美国德克萨斯大学奥斯汀分校物理系)

**摘要** 通常的自旋流定义在描述自旋 – 轨道耦合系统中的自旋输运是不完整的与非物理的. 文章作者提出在这类系统中自旋流的恰当定义. 新定义的自旋流克服了通常定义下的本质缺点, 可通过实验直接观测.

**关键词** 自旋电子学, 自旋流, 自旋 – 轨道耦合, 自旋霍尔效应, 昂萨格对易关系

## Proper definition of spin current in spin-orbit coupled systems

SHI Jun-Ren<sup>1,†</sup> ZHANG Ping<sup>2</sup> XIAO Di<sup>3</sup> NIU Qian<sup>3</sup>

(1 International Center for Quantum Structures, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

(2 Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

(3 Department of physics, The University of Texas at Austin, Austin, Texas 78712, USA)

**Abstract** The conventional definition of spin current is incomplete and unphysical in describing spin transport in systems with spin – orbit coupling. A proper and measurable spin current is established in this study, which fits well into the standard framework of near – equilibrium transport theory and has the desirable property to vanish in insulators with localized orbitals. Experimental implications of our theory are discussed.

**Keywords** spintronics, spin current, spin-orbit coupling, spin Hall effect, Onsager relation

半导体自旋电子学的一个重要研究内容是利用系统中固有的自旋 – 轨道耦合作用, 通过纯电学方法来产生并维持自旋的相干输运. 例如, 理论上预言, 通过对具有自旋 – 轨道耦合作用的样品施加纵向电场, 会产生横向自旋流, 即自旋向上和向下的电子分别沿横向相反的方向流动, 形成所谓的自旋霍尔效应<sup>[1–6]</sup>. 目前这方面的研究正密集展开, 所有的工作几乎无一例外地采用通常的自旋流定义, 即自旋算符和速度算符的对称乘积, 来研究各种半导体系统中的自旋霍尔输运性质, 而一个基本问题, 即该自旋流是否真正能够描述自旋的输运(特别是对于具有自旋 – 轨道耦合作用的系统来说)性质, 却被大多数研究者所忽略.

图1的例子演示了通常自旋流定义的根本问题: 电子在图示的两列杂质散射下, 自旋与(沿水平方向的)运动方向交替改变. 根据通常自旋流的定义, 这样一个散射过程会在两列杂质之间的区域贡献一个沿水平方向的自旋流. 如果一个宏观的系统包含很多这样

的区域, 该散射过程无疑会对全系统的平均自旋流产生一个非零的贡献. 然而, 从另一个角度看, 由于电子在水平方向的运动是局域的, 显然不可能有真正的自旋输运, 或对样品边界的自旋积聚产生贡献. 这个例子演示了在自旋不守恒的情况下, 采用通常的自旋流定义可能会给出不正确的结论.

实际上, 由于自旋 – 轨道耦合带来的自旋不守恒效应, 电子(或空穴)自旋自由度的输运性质与其电荷自由度的输运性质完全不同. 例如, 由于电荷本身在输运过程中是守恒的, 因此满足简单的电荷密度连续性方程. 电荷输运的驱动力直接地来自力学力(如电场力)或热力学力(如温度梯度), 不同驱动力对应的输运系数满足通常的昂萨格对易关系. 相反, 自旋密度连续性方程无法利用通常定义的自旋

\* 中国科学院百人计划, 国家自然科学基金(批准号:10544004)资助项目

2006-03-28 收到初稿, 2006-05-22 修回

† 通讯联系人. Email: jrshi@aphy.iphy.ac.cn

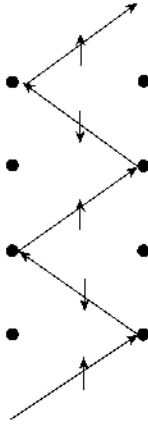


图1 一个简单的例子演示传统的自旋流定义在自旋不守恒的情况下不能描述自旋输运

流直接建立起来,通常定义下的自旋流所对应的共轭力也并不清楚,由此势必会产生许多概念上的模糊和非物理效应.最近的一个突出例子是研究自旋霍尔效应时,人们发现对于某些自旋-轨道耦合系统而言,即使没有任何驱动,其自旋霍尔流也不为零,这显然是非物理的.另外从实验的角度来看,由于通常定义的自旋流不守恒,因此其与实验中观测到的自旋积累<sup>[7-8]</sup>无法直接对应起来.

综上所述,如何定义实验上可测并具有真正物理意义的自旋流是自旋电子学研究的一个基本问题,该问题具有重要意义.通过深入分析自旋-轨道耦合系统中自旋输运的本质特点,最近我们提出了一个自旋流的新定义<sup>[9]</sup>,并在标准的近平衡输运理论框架内研究了新定义自旋流的线性响应性质.我们的研究表明,新定义的自旋流克服了通常定义产生的如上所述的种种模糊和混淆.与通常定义相比,新定义自旋流的表达式中引入自旋矩偶的贡献.我们发现,除了通过引入该项使得自旋流保持守恒外,还消除了通常定义自旋流的两个本质缺点:(1)对于简单的安德森绝缘体,新定义的自旋流恒为零;(2)可以赋予新定义自旋流以一个物理的共轭力,即自旋力.相应地,电场力驱动自旋输运系数和自旋力驱动的电荷载运系数满足昂萨格对易关系.上述性质使得我们新定义的自旋流能够完整地描述自旋输运的性质,并且提供了实验测量自旋流的坚实基础.除了我们的工作,最近国内外几个为数不多的研究组也对自旋流的定义问题进行了深入的探索<sup>[10-11]</sup>.

利用量子力学原理,可以得到空间  $r$  处自旋密

度满足的连续性方程(以自旋  $z$  分量为例):

$$\frac{\partial S_z}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_s = \mathcal{A}_z, \quad (1)$$

这里  $\mathbf{J}_s$  代表通常定义下的自旋流,等式右端代表自旋矩密度.我们注意到对于通常的自旋-轨道耦合系统来说,自旋矩密度对一个宏观体积的平均为零.在这种情况下,自旋矩密度可以写成自旋矩偶密度  $\mathbf{P}_\tau$  的散度的形式,  $\mathcal{A}_z(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \mathbf{P}_\tau(\mathbf{r})$  (1)式可以重写为

$$\frac{\partial S_z}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{J}_s + \mathbf{P}_\tau) = 0, \quad (2)$$

因此,自旋密度的连续性方程变成了无源的方程<sup>1)</sup>,这说明自旋密度的系统体平均是守恒的,相应的(宏观上的)守恒自旋流应为

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_s &= \mathbf{J}_s + \mathbf{P}_\tau \\ &= \frac{d(\hat{r} \hat{S}_z)}{dt}. \end{aligned} \quad (3)$$

(3)式给出了新定义的自旋流,它是自旋位移算子  $\hat{r} \hat{S}_z$  的时间全微分.在推导(3)式第二个表达式时,我们利用了如下关系:  $\int dV \mathbf{P}_\tau = -\int dV \mathbf{r} \nabla \cdot \mathbf{P}_\tau = \int dV \mathcal{A}(\mathbf{r})$ . 与自旋流的通常定义( $\mathbf{J}_s$ )相比,可以看出,新定义包含了自旋矩偶的贡献.由于新定义自旋流的时间全微分性质,对于自旋位移算子可物理定义(如简单安德森绝缘体系统)的无扰动的量子力学系统来说,新定义的自旋流为零,显然这是物理上期望获得的结果,因此克服了通常定义的自旋流某些情况下在无外场驱动时也不消失的本质缺点.更进一步,我们还发现,对于上述由空间局域的本征态构成的物理系统来说,新定义自旋流的线性输运系数也为零.

作为自旋位移算子的时间全微分,自然地,新定义的自旋流有一个共轭的力  $F_s$  与之对应,该共轭力可由塞曼能或自旋相关的化学势梯度给出,我们称之为自旋力.这说明,自旋输运会伴随有能量耗散(类似于电流伴生的焦耳热),相应的耗散率是自旋流与自旋力的乘积.因此我们就清楚地看到,通过测量塞曼场梯度(自旋力)和“焦耳热”,可以在热力学意义上确定系统的自旋流.

更进一步,新定义下的自旋输运系数与其他热力学输运系数之间可以建立起严格的昂萨格对易关系.比如,当对系统同时施加电场力和自旋力微扰

1) 考虑实际体系时(1)式和(2)式右端还要包括自旋的散射贡献,即  $S_z/\tau_s$ , 其中  $\tau_s$  代表自旋弛豫时间

时,系统的自旋流和电荷流的线性响应可以写成如下形式:

$$\begin{pmatrix} \mathcal{J}_s \\ J_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma^{ss} & \sigma^{sc} \\ \sigma^{cs} & \sigma^{cc} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_s \\ E \end{pmatrix}, \quad (4)$$

这里  $J_c$  和  $\mathcal{J}_s$  分别是电荷流和新定义的自旋流,  $\sigma^{ss}$  ( $\sigma^{cc}$ ) 是自旋力(电场力)的自旋流(电荷流)响应系数张量,而  $\sigma^{sc}$  则是电场力的自旋流响应系数张量,其中包含了自旋霍尔系数,同样,  $\sigma^{cs}$  是自旋力的电荷流响应系数张量,代表倒易自旋霍尔效应. 利用线性响应理论或直接利用普适的昂萨格关系,我们可以得到自旋霍尔系数张量  $\sigma^{sc}$  和倒易自旋霍尔系数张量  $\sigma^{cs}$  之间的关系为

$$\sigma_{\alpha\beta}^{sc} = -\sigma_{\beta\alpha}^{cs}, \quad (5)$$

式中的负号是由于自旋位移算子的时间反演奇宇称性质所致. 可以看到,正是由于自旋流定义为自旋位移算子的时间全微分,昂萨格关系才能建立起来,而通常定义的自旋流是无法与自旋力驱动的电荷流建立昂萨格关系的. 直观地看,这是因为自旋力对应着自旋位移,而自旋位移的时间微分给出的是新定义的自旋流,而不是通常定义的自旋流.

上述昂萨格关系启示我们可以采用电学方法测量自旋霍尔系数. 对具有自旋-轨道耦合作用的样品施加纵向自旋力,产生霍尔电荷流. 通过测量该电荷流和自旋力,可以确定自旋力驱动的电荷霍尔系数  $\sigma_{xy}^{cs}$ , 从而就确定了自旋霍尔系数  $\sigma_{yx}^{sc}$ . 在实际测量中,纵向自旋力需要自旋流来维持,这可以通过自旋泵浦的方法来实现. 实际计算新定义的自旋霍尔系数,需要细致考察自旋矩偶带来的新贡献. 我们已利用线性响应久保(Kubo)公式,严格推导出自旋输运系数的解析表达式,其内禀部分通过体系的电子能态信息给出,而外禀部分(包括杂质效应和多电子效应)可利用标准的格林函数技术系统地数值或微扰计算得到. 另外我们还发展了一套与全量子力学线性响应理论相当的半经典方法,建立了布洛赫载流子的半经典运动方程,用以描述自旋霍尔效应及倒易自旋霍尔效应,参见文献[12]. 目前已有越来越多的工作开始着手研究我们新定义的自旋流,一些具有基本意义的现象将会被逐渐揭示出来. 例如,日本的小组利用这个定义对半导体材料中的自旋霍尔效应重新作了计算<sup>[13]</sup>,发现在只有非磁性杂质的半导体材料中并不存在自旋霍尔效应,这与之前的结论完全不同.

和通常定义的自旋流不同,样品边界的自旋积累与新定义的自旋流有直接对应关系. 为看到这一点,不妨考虑一个具有平滑边界(由缓变边界势表征)的样品. 假设边界势的特征变化长度远大于电子的平均自由程,在此假设下,可以利用自旋密度的连续性方程来讨论边界问题,由此不难得到稳态条件下,样品边界处单位面积内的自旋积累为:  $\bar{S}_z = \mathcal{J}_s^{\text{bulk}} \tau_s$ . 因此我们清楚地看到,实验中测量的自旋积累实际上是新定义的自旋流  $\mathcal{J}_s$  引起的.

综上所述,我们新定义的自旋流可以很好地描述具有自旋-轨道耦合作用的体材料的自旋输运性质:(1)通过自旋连续性方程,材料的场致自旋积累效应与自旋流有明确的对应关系;(2)对于由局域电子轨道构成的安德森绝缘体来说,新定义的自旋流在平衡情况或近平衡情况下都为零,再结合性质(1),可以看到此类材料中不会出现自旋积累;(3)更重要的是,可以赋予新定义的自旋流以一个物理的共厄力(自旋力),这使得自旋输运可以在标准的热力学近平衡输运理论框架内进行讨论. 正是由于共厄力的存在,我们才能建立起自旋输运系数和其他输运系数的昂萨格关系,从而为实验上真正观测到自旋霍尔效应提供了一整套热力学或纯电学方案. 而通常定义的自旋流没有共厄力,因此也无法给出相应的能量和流的耗散关系,缺失了基本的物理内涵. 因此,重新定义自旋流不仅必要,而且重要.

## 参 考 文 献

- [ 1 ] Dyakonov M I, Perel V I. JETP, 1971, 33 : 1053
- [ 2 ] Hirsch J E. Phys. Rev. Lett., 1999, 83 : 1834
- [ 3 ] Zhang S. Phys. Rev. Lett., 2000, 85 : 393
- [ 4 ] Murakami S, Nagaosa N, Zhang S C. Science, 2003, 301 : 1348
- [ 5 ] Sinova J *et al.* Phys. Rev. Lett., 2004, 92 : 126603
- [ 6 ] Culcer D *et al.* Phys. Rev. Lett., 2004, 93 : 046602
- [ 7 ] Kato Y K *et al.* Science, 2004, 306 : 1910
- [ 8 ] Wunderlich J, Kaestner B, Sinova J *et al.* Phys. Rev. Lett., 2005, 94 : 047204
- [ 9 ] Shi J R, Zhang P, Xiao D *et al.* Phys. Rev. Lett., 2006, 96 : 076604
- [ 10 ] Sun Q F, Xie X C. Phys. Rev. B., 2005, 72 : 245305
- [ 11 ] Wang Y, Xia K, Su Z B *et al.* Phys. Rev. Lett., 2006, 96 : 066601
- [ 12 ] Zhang P, Niu Q. cond - mat/0406436 (unpublished)
- [ 13 ] Sugimoto N, Onoda S, Murakami S *et al.* cond - mat/0503475