

1.Landaur-Buttiker 方程

我们下面将会推导电流的表达式，从左边导线流出的电流可以通过粒子数算符的时间导数来求出

$$J_L = e\langle \dot{N}_L \rangle = \frac{ie}{\hbar} \langle H_L, N_L \rangle \quad (1.62)$$

其中 $N_L = \sum_{k,n \in L} c_{k,n}^\dagger c_{k,n}$, $H = H_L + H_T + H_{\text{dot}}$ ，通过对对易子计算我们可以得到

$$J_L = -\frac{ie}{\hbar} \sum_{k,n \in L, m} \{V_{k,n,L}(c_{k,n}^\dagger c_m) - V_{k,n,L}^\dagger(c_m^\dagger c_{k,n})\} \quad (1.63)$$

为了方便进一步的计算电流，我们定义两个双时格林函数：

$$\begin{aligned} G_{k,n,L}^<(t, t') &= i\langle c_{k,n}^\dagger(t') c_m(t) \rangle, \\ G_{k,n,L}^>(t, t') &= i\langle c_m^\dagger(t') c_{k,n}(t) \rangle, \end{aligned} \quad (1.64)$$

显然上面式1.63的项是式1.64中两项，我们只要知道了格林函数的解，就能够很轻松得到电流的值，注意到 $G_{k,n,L}^<(t, t) = -[G_{k,n,L}^>(t, t)]^*$ ，因此电流公式可以化简写为

$$J_L = -\frac{2e}{\hbar} \text{Re} \left[\sum_{k,n \in L, m} V_{k,n,L} G_{k,n,L}^<(t, t) \right] \quad (1.65)$$

利用运动方程或者Wick收缩的方法[5]，我们可以得到非平衡格林函数（闭路格林函数）

$$G_{k,n,L}(t, t') = \sum_m \int_C dt_1 G_{k,n,L}(t, t_1) V_{k,n,m}^< \theta_{m,L}(t_1, t'), \quad (1.66)$$

其中积分路径 C 为时间 t_1 从 $-\infty \rightarrow +\infty$ 然后再从 $+\infty \rightarrow -\infty$ 整个环路积分， $G_{m,L}(t_1, t_1)$ 为中间散射区部分的闭路格林函数。利用Langreth定理，我们可以将闭路格林函数转化为实时格林函数（也就是上面的双时格林函数），对式1.66 使用此定理，我们可以得到式1.64中双时格林函数的解为

$$G_{k,n,L}^<(t-t') = \sum_m \int dt_1 V_{k,n,m}^< [G_{m,L}^<(t-t_1) g_{m,L}^<(t_1-t') + G_{m,L}^<(t-t_1) g_{m,L}^>(t_1-t')] , \quad (1.67)$$

- 17 -

第一章 输运基本理论简介

其中格林函数 $g_{m,L}^<(t_1-t')$ 在式1.58和1.59中给出了定义，以及在体系之间没有耦合前导线处于平衡态的函数结果。我们对式1.67做傅里叶变换后可得

$$G_{k,n,L}^<(e) = \sum_m V_{k,n,m}^< [G_{m,L}^<(e) g_{m,L}^<(e) + G_{m,L}^<(e) g_{m,L}^>(e)] , \quad (1.68)$$

将上面的结果带入到式1.65中，我们可以得到

$$J_L = -\frac{2e}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \text{Re} \left[\sum_{k,n \in L, m} V_{k,n,L} V_{k,n,m}^< [G_{m,L}^<(e) g_{m,L}^<(e) + G_{m,L}^<(e) g_{m,L}^>(e)] \right] . \quad (1.69)$$

我们知道对于任意复数来说 $a = (a + ia)/2$ ，所以通过对式1.69展开成复数相加的形式，利用如下关系

$$\begin{aligned} G_{m,L}^< &= [G_{m,L}^>]^* , \\ G_{m,L}^> &= -[G_{m,L}^<]^* , \\ G^* - G^a &= G^< - G^> , \end{aligned} \quad (1.70)$$

我们可以把式1.69变为

$$J_L = -\frac{e}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \text{Tr} \{ [G^> \Sigma_L^< - G^< \Sigma_L^>] \} , \quad (1.71)$$

其中 Σ 一般表达式为

$$[\Sigma_{k,n,L}^<]_{mn} = \sum_k V_{k,n,m}^< V_{k,n,L} , \quad (1.72)$$

特别的 $\Sigma^{<>}$ 为

$$[\Sigma_{k,n,L}^{<>}]_{mn} = \sum_k V_{k,n,m}^<> V_{k,n,L} = i\Gamma_{mn}^<>(e) f_{k,n}(e) . \quad (1.73)$$

对于无相互作用的哈密顿量来说，Dyson、Keldysh方程为

$$\begin{aligned} G^<(e) &= g^<(e) + g^<(e) \Sigma^<(e) G^<(e) , \\ G^<(e) &= G^<(e) \Sigma^<(e) G^<(e) , \\ G^<(e) &= G^<(e) \Sigma^<(e) G^<(e) , \end{aligned} \quad (1.74)$$

- 18 -

第一章 输运基本理论简介

其中自能 $\Sigma = \Sigma_L + \Sigma_R$ ，将式1.74的关系式带入到式1.71就可以得到我们常见非常普遍的电流公式

$$J_L = -\frac{e}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \text{Tr} \{ f(e) [f_L(e) - f_R(e)] \} , \quad (1.75)$$

其中透射概率为

$$\mathcal{T}(e) = \text{Tr} \{ \Gamma^<(e) G^<(e) \Gamma^>(e) G^<(e) \} . \quad (1.76)$$

从此我们便可以求出电流和电导的公式，非平衡格林函数的方法在没有相互作用的情况下和利用散射矩阵来计算透射概率是一致的，这个讨论详细可见文献[6]，更加一般的比如散射区存在由于声子散射导致的非弹性散射过程，则可以通过更加普遍的式1.71来进行计算，所以非平衡格林函数来计算观相干输运是具有更普遍的应用性，而散射矩阵的方法仅仅适用于单电子的情形，无法处理粒子间相互作用体系的输运性质。

2. 垂直和平行磁性异质结的磁化强度典型值

垂直各向异性可以达到 1T，面内各向异性一般到 1000Gs