

自旋轨道耦合作用的等效磁场

冯玉芳 张瑜瑜

(重庆大学物理学院, 重庆 401330)

摘要 自旋与电荷一样, 是电子的固有属性, 电子的周期性轨道运动产生的磁场与电子的自旋磁矩相互作用, 这种磁相互作用就是自旋轨道相互作用。在原子物理学中, 这种自旋轨道作用会影响原子光谱的精细结构, 然而教材中缺少自旋轨道耦合作用在二维半导体材料中的微观描述。本文将引入 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合作用的哈密顿量, 研究单电子在无外场下二维平面内运动, 讨论一种或者两种自旋轨道耦合的哈密顿量表示。通过自旋与等效磁场耦合的塞曼能量表示, 本文计算了本征态下不同自旋轨道耦合作用下的等效磁场, 从而有助于探索二维半导体材料中不同自旋轨道耦合作用下的物理特性。

关键词 自旋轨道耦合; 等效磁场; 塞曼能量

AN EFFECTIVE MAGNETIC FIELD OF SPIN-ORBIT COUPLING

FENG Yufang ZHANG Yuyu

(College of Physics, Chongqing University, Chongqing 401330)

Abstract Spin, like charge, is an internal property of electrons. The magnetic field generated by the periodic orbital motion of electrons interacts with their spin magnetic moment, which is known as spin orbit interaction. In Atomic Physics, it is pointed out that this spin orbit interaction can affect the fine structure of atomic spectra, but the textbook lacks a microscopic description of spin orbit coupling in two-dimensional semiconductor materials. In this paper, we will introduce the Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling Hamiltonian to study the motion of a single electron in a two-dimensional plane in the absence of an external field, and discuss the Hamiltonian representation of one or two types of spin orbit coupling. By using the Zeeman energy representation of spin and equivalent magnetic field coupling, we calculate the effective magnetic field in the eigenstates. It is meaningful to study the novel physics induced by different spin-orbit interactions in two-dimensional semiconductors.

Key words spin-orbit coupling; effective magnetic field; Zeeman energy

从施特恩-盖拉赫实验以及乌伦贝克与古兹米特提出电子自旋的假设, 我们知道了自旋是电子的固有属性, 从而能够解释原子光谱的精细结

构以及塞曼效应等物理现象。

在原子物理的学习中, 我们了解到, 在单电子原子的能谱中, 原子中电子与原子核的静电相互

收稿日期: 2023-07-19

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(12075040); 重庆大学教改项目(量子基础物理的课程群建设)。

作者简介: 张瑜瑜, 重庆大学物理学院教授, yuyuzh@cqu.edu.cn。

引文格式: 冯玉芳, 张瑜瑜. 自旋轨道耦合作用的等效磁场[J]. 物理与工程, 2024, 34(1): 62-66.

Cite this article: FENG Y F, ZHANG Y Y. An effective magnetic field of spin-orbit coupling[J]. Physics and Engineering, 2024, 34(1): 62-66. (in Chinese)

作用是一项主要的相互作用,正是它决定了谱系的主要特征。同时,周期性运动的电子会产生磁场,由此产生的磁相互作用则决定了谱系的精细结构^[1]。这种电子自旋与轨道运动产生的磁场相互作用,叫做自旋轨道相互作用。一般来说,我们比较熟悉电子和外磁场发生相互作用,即塞曼效应,而说到自旋轨道耦合我们却难以有简洁而清晰的认识。从经典的角度来看,作周期运动的电荷势必会产生一个磁场。在学习原子物理课程时,我们知道电子轨道运动产生的磁场 B 与电子的轨道角动量有关($B \propto l$),且电子具有自旋磁矩 μ_s ($\mu_s \propto s$),因此原子内磁场的塞曼能可以表示为

$$U = -\mu_s \cdot B \quad (1)$$

可见能量正比于 $s \cdot l$,被称为“自旋轨道耦合”项^[1]。它是电子轨道运动产生的磁场与自旋磁矩相互作用产生的附加能量,而正是这种磁相互作用引起了谱系的精细结构。

在原子物理学教学中,对自旋轨道耦合效应一般没有深入探讨,而自旋轨道耦合效应是诸多二维半导体材料结构中新奇物理现象产生的重要原因,也是自旋电子学研究的重要物理问题之一,非常值得我们探讨学习。

在自旋轨道耦合效应中,我们可以将自旋轨道相互作用看作是电子自旋与一个等效磁场之间的磁相互作用,此时自旋轨道耦合的作用就等同于给电子外加了一个等效磁场,进而我们可以用不同的等效磁场来表示不同的自旋轨道耦合作用,以便深化理解。

结合原子物理学中所描述的有关自旋轨道耦合效应的最简单原理,我们将进一步介绍半导体材料两种重要的 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合作用,这两种不同的作用有助于研究塞曼分裂,共振自旋霍尔效应,及自旋进动等有意义的前沿科学问题^[2,3]。本文将分别给出 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合作用的不同等效磁场,理解自旋轨道耦合及其等效磁场之间的联系。

1 自旋轨道耦合介绍

自旋轨道耦合(spin-orbit coupling, SOC)本质的特点是,即使在没有外部磁场的情况下,电子在电场中运动也会受到一个与动量相关的类似磁场的作用,这个等效磁场与电子自旋磁矩发生相

互作用。因此,自旋轨道耦合的哈密顿量一般形式表示为

$$H_{soc} \sim \mu_B \sigma \cdot B_{eff} \quad (2)$$

其中, μ_B 表示玻尔磁子, σ 表示泡利矩阵, B_{eff} 表示自旋-轨道耦合的等效磁场。因此,自旋-轨道耦合可理解为一个自旋磁矩和等效磁场的相互作用。

如果电子以动量 p 在一个电场中运动,其会感受到一个等效的磁场 $B_{eff} \sim E \times p / mc^2$,从而产生依赖动量的塞曼能量^[4,5],这部分能量即为自旋轨道耦合能量,此时哈密顿量应采取以下形式

$$H_{soc} \sim \mu_B (E \times p) \cdot \sigma / mc^2 \quad (3)$$

在晶体中电场由晶体势的梯度 $E = -\nabla V$ 给出。根据介质材料所受力的性质和材料结构对称性的不同,我们可以将自旋轨道耦合分为 Rashba 自旋轨道耦合和 Dresselhaus 自旋轨道耦合。

1.1 Rashba 自旋轨道耦合

1960 年, Rashba 引入了一种简单的自旋轨道耦合形式,而后, Bychkov 和 Rashba 等人将这种自旋轨道耦合形式应用到具有结构反演对称性破缺的二维电子气模型中,以解释二维半导体电子共振自旋霍尔效应的特性,这种自旋轨道耦合被称为 Rashba 自旋轨道耦合^[6,7]。在各种不同的自旋轨道耦合作用形式中, Rashba 自旋轨道耦合作用的研究最早开始于半导体材料,在半导体异质结处形成的较大电势梯度导致了较强的自旋轨道耦合效应,并因其强度可由外加电场灵活调控而备受关注。

Rashba 自旋轨道耦合通常由半导体材料的结构反演对称性破缺引起,产生某个方向的界面电场 $E = E_z \hat{z}$ 。自旋轨道耦合作用的哈密顿量可表示为^[5]

$$H_R = (\alpha / \hbar) (\sigma \times p) \cdot \hat{z} \quad (4)$$

也可以写作

$$H_R = (\alpha / \hbar) (p_y \sigma_x - p_x \sigma_y) \quad (5)$$

其中, α 是 Rashba 自旋轨道耦合强度,也被称为 Rashba 参数。

1.2 Dresselhaus 自旋轨道耦合

1955 年, Dresselhaus 注意到在缺乏体反演对称性的半导体材料中,例如 GaAs 或者 InSb,电子的自旋与轨道之间的作用能够引起半导体的能带劈裂,由此发现这种体反演不对称引起的自旋轨道耦合效应则为 Dresselhaus 自旋轨道耦合^[8]。

哈密顿量可以表示如下^[5]

$$H_D = (\beta/\hbar)(p_x\sigma_x - p_y\sigma_y) \quad (6)$$

其中, β 是 Dresselhaus 自旋轨道耦合强度。

2 等效磁场

由于自旋轨道耦合效应可以被看作是电子自旋和一个等效磁场之间的相互作用。由此, 对于不同的 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合可以得出不同的等效磁场, 而在一定程度上, 等效磁场可以表现对应自旋轨道耦合的特征。

在没有外场存在的情况下, 我们考虑二维电子气中的单个电子运动, 总能量包括动能和自旋轨道耦合能量, 且 x, y 方向的动量守恒。单电子的哈密顿量表示为

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + \sigma \cdot B_{eff} \quad (7)$$

其中, p 是电子动量, m^* 是电子的有效质量, σ 是泡利矩阵, B_{eff} 是自旋轨道耦合等效磁场。哈密顿量中, 第一项表示动能项, 第二项是自旋轨道耦合能量, 表示为一个自旋磁矩与等效磁场相互作用的塞曼能量。

2.1 Rashba 自旋轨道耦合的等效磁场

首先, 我们将研究 Rashba 自旋轨道耦合作用的等效磁场。二维电子气中 Rashba 自旋轨道耦合作用的完整哈密顿量应写为

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar}(\sigma \times p) \cdot \hat{z} \quad (8)$$

其中, 第一项代表动能, 第二项代表 Rashba 自旋轨道耦合能, $p = \hbar k$ 。

对比方程(7), 我们将 Rashba 自旋轨道耦合项表示为

$$H_R = \alpha \sigma \cdot (k \times \hat{z}) \quad (9)$$

其中, k 代表电子的波矢, 是一个二维矢量 $k(\cos\phi, \sin\phi)$, 其中运用了混合积运算 $((a \times b) \cdot c = a \cdot (b \times c) = b \cdot (c \times a))$ 。结合式(7)和式(9), Rashba 自旋轨道耦合的等效磁场的表达式

$$B_R = \alpha(k \times \hat{z}) \quad (10)$$

从式(10)中, 我们能看出 Rashba 自旋轨道相互作用的等效磁场依赖于电子动量, 并和 Rashba 自旋轨道耦合强度 α 有关。该等效磁场也可以写成

$$B_R = \alpha k \begin{pmatrix} \sin\phi \\ -\cos\phi \end{pmatrix} \quad (11)$$

Rashba 自旋轨道耦合的等效磁场与电子波矢 k 的关系, 如图 1 所示。图中黑色箭头表示电子波矢 k , 灰色箭头示意该点的磁场 B_R 方向和大小, 由 x 和 y 方向的磁场分量构成。

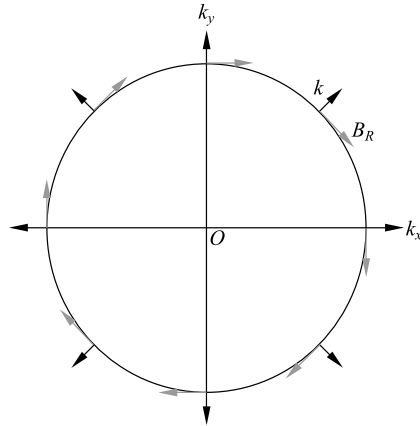


图 1 Rashba 自旋轨道作用等效磁场

2.2 Dresselhaus 自旋轨道耦合的等效磁场

我们考虑 Dresselhaus 自旋轨道耦合作用的哈密顿量

$$H_D = \beta(k_x\sigma_x - k_y\sigma_y) \quad (12)$$

其中, k_x 与 k_y 表示电子波矢的二维分量, β 表示 Dresselhaus 自旋轨道耦合的强度。

我们将式(12)所表达的哈密顿量写成矩阵形式

$$H_D = \beta k \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} \quad (13)$$

该哈密顿量的本征态可以表示为

$$|\Psi_{\pm}\rangle_D = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm e^{-i\phi} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (14)$$

其本征能量为 $E_{\pm}^D = \pm\beta k$ 。由此, 可以求出泡利算符的平均值

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle_{\pm} &= \begin{pmatrix} \langle \Psi_{\pm}^D | \sigma_x | \Psi_{\pm}^D \rangle \\ \langle \Psi_{\pm}^D | \sigma_y | \Psi_{\pm}^D \rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\phi \\ \mp \sin\phi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (15)$$

另一方面, 自旋轨道耦合可以被看做自旋和等效磁场的相互作用

$$H_D = \sigma \cdot B_D \quad (16)$$

因此, 式(12)与式(16)所表达的哈密顿量拥有相同的本征值

$$\langle \sigma \rangle_{+} \cdot B_D = \beta k \quad (17)$$

结合式(15), 得到等效磁场为

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_D &= \beta k \langle \Psi_+^D | \boldsymbol{\sigma} | \Psi_+^D \rangle \\ &= \beta k \begin{pmatrix} \cos\phi \\ -\sin\phi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (18)$$

通过上面的式子,我们可以画出 Dresselhaus 自旋轨道耦合的等效磁场示意图,如图 2 所示。灰色箭头示意等效磁场 B_D ,其 x 和 y 磁场分量由式(18)给出,黑色箭头表示电子波矢 k 。这个等效磁场依赖于电子波矢 k ,但和 Rashba 自旋轨道作用的等效磁场不同。

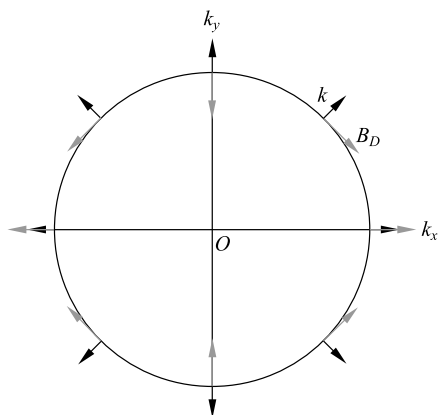


图2 Dresselhaus 自旋轨道作用等效磁场

2.3 两种自旋轨道耦合的等效磁场

前文仅仅考虑了只存在 Rashba 或者 Dresselhaus 其中一种自旋轨道耦合作用的等效磁场。我们将考虑两种自旋轨道耦合作用同时存在的等效磁场,在这种情况下将出现自旋螺旋运动^[9-10]。

Rashba 和 Dresselhaus 两种自旋轨道耦合作用的哈密顿量表示为

$$\begin{aligned} H_{RD} &= (\alpha/\hbar)(p_y\sigma_x - p_x\sigma_y) + \\ &(\beta/\hbar)(p_x\sigma_x - p_y\sigma_y) \end{aligned} \quad (19)$$

上式可写成矩阵形式

$$H_{RD} = k\gamma \begin{pmatrix} 0 & ie^{-i\varphi} \\ -ie^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \quad (20)$$

其中, $\gamma(\phi) = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta\sin 2\phi}$, $e^{-i\varphi} \equiv (\alpha e^{-i\phi} - i\beta e^{i\phi})/\gamma(\phi)$ 。其本征态为

$$|\Psi_{\pm}\rangle_{RD} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm ie^{-i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (21)$$

本征值为: $E_{\pm}^{RD} = \pm \gamma k$ 。

泡利算符平均值可以表示为

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\pm} &= \begin{pmatrix} \langle \Psi_{\pm}^{RD} | \sigma_x | \Psi_{\pm}^{RD} \rangle \\ \langle \Psi_{\pm}^{RD} | \sigma_y | \Psi_{\pm}^{RD} \rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sin\varphi \\ \mp \cos\varphi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (22)$$

由于自旋轨道耦合作用哈密顿量可以表示为自旋和等效磁场相互作用的塞曼能量

$$H_{RD} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_{RD} \quad (23)$$

两种哈密顿量式(20)和式(23)具有相同的能量本征值,可以得到关系式

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\pm} \cdot \mathbf{B}_{RD} = \gamma k \quad (24)$$

依据式(22),等效磁场可以表示为

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{RD} &= \gamma(\phi)k \langle \Psi_+^{RD} | \boldsymbol{\sigma} | \Psi_+^{RD} \rangle \\ &= \gamma(\phi)k \begin{pmatrix} \sin\varphi \\ -\cos\varphi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (25)$$

当 $\alpha = \beta$ 时, $\gamma(\phi) = \sqrt{2}\alpha(\sin\phi + \cos\phi)$, $\varphi = \pi/4$, 其等效磁场应为

$$\mathbf{B}_{RD} = \alpha k (\sin\phi + \cos\phi) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

等效磁场如图 3 所示。在该图中,灰色箭头示意等效磁场 B_{RD} ,黑色箭头表示电子波矢 k 。

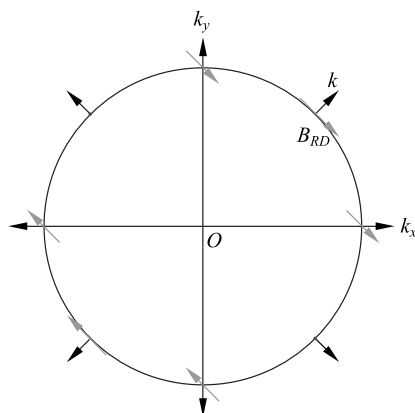


图3 Rashba 和 Dresselhaus 两种自旋轨道耦合作用的等效磁场

当只考虑 Rashba 自旋轨道耦合时($\alpha \neq 0, \beta = 0$),根据 $\gamma(\phi)$ 的定义得到 $\gamma(\phi) = \alpha$, $\varphi = \phi$, 方程(25)等于方程(11),即得到 Rashba 自旋轨道耦合等效磁场。

当我们同时考虑 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合时,体系的本征能量应为 $E_{\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \gamma(\phi)k$ 。图 4 给出自旋向上的一支能量 E_+ ,在不同 α/β 条件下能量随 α 的线性变换。

3 结语

我们分别介绍了 Rashba 和 Dresselhaus 两种自旋轨道耦合作用,并表示为自旋磁矩和等效磁

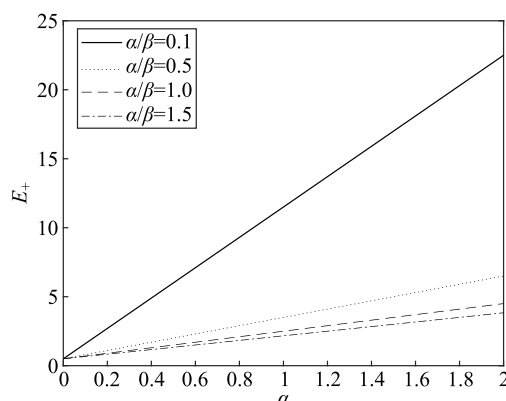


图4 不同 α/β 下本征能量 E_+ 随 α 变化, 其中动量与 x 轴夹角 $\phi = \pi/4$

场耦合的塞曼能量, 从而得到一种或者两种自旋轨道耦合情况下的等效磁场。

本文中, 我们通过解自旋轨道耦合哈密顿量的本征函数和本征能量, 求其本征态下泡利算符平均值 $\langle \sigma \rangle_{\text{SOC}}$ 来得出等效磁场的表达式, 且依赖于电子波矢 k 。此方法可看成将自旋 1/2 电子类比磁场中的小磁针, 以电子受自旋轨道耦合作用的自旋取向表示磁场。通过本文给出的等效磁场, 我们了解到自旋轨道耦合作用相当于给电子外加了一个等效磁场, 从而有助于分析半导体材料中不同自旋轨道耦合作用引起的物理现象。

参 考 文 献

[1] 杨福家. 原子物理学[M]. 4版. 北京: 高等教育出版社, 2008: 151-190.

[2] SHEN S Q, BAO Y J, MICHAEL M A, et al. Resonant spin Hall conductance in quantum Hall systems lacking bulk and structural inversion symmetry[J]. Physical Review B, 2005, 71: 155316.

[3] YANG W, CHANG K. Magnetotransport in two-dimensional electron gas: The interplay between spin-orbit interaction and Zeeman splitting[J]. Physical Review B, 2006, 73: 045303.

[4] WINKLER R. Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems[M]. Berlin: Springer, 2003: 69-125.

[5] MANCHON A, KOO H C, NITTA J, et al. New perspectives for Rashba spin-orbit coupling[J]. Nature Materials 2015, 14: 871-882.

[6] 张跃林, 张金星. 自旋轨道耦合与自旋霍尔效应[J]. 北京师范大学学报(自然科学版), 2016-12, 52(6): 781-789.

ZHANG Y L, ZHANG J X. Spin-orbit coupling and spin hall effect[J]. Journal of Beijing Normal University (Natural Science), 2016-12, 52(6): 781-789. (in Chinese)

[7] RASHBA E. Properties of semiconductors with an extremum loop. 1. Cyclotron and combinational resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop[J]. Sov. Phys. Solid State 2, 1960: 1109-1122.

[8] DRESSELHAUS G. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures[J]. Physical Review B, 1955, 100: 580-586.

[9] LIU M H, CHEN K W, CHEN S H, et al. Persistent spin helix in Rashba-Dresselhaus twodimensional electrons systems[J]. Physical Review B, 2006, 74: 235322.

[10] ZHANG R, BIAO Y C, YOU W L, et al. Generalized rashba coupling approximation to a resonant spin hall effect of the spin-orbit coupling system in a magnetic field[J]. Chinese Physics Letters, 2021, 38: 077304.

(上接第 34 页)

[7] LI L, PANDEY A, WERDER D J, et al. Efficient synthesis of highly luminescent copper indium sulfide-based core/shell nanocrystals with surprisingly long-lived emission[J]. J. Am. Chem. Soc., 2011, 133(5): 1176-1179.

[8] LI C, DUAN L, QIU Y, et al. Universal trap effect in carrier transport of disordered organic semiconductors: Transition from shallow trapping to deep trapping[J]. J. Phys. Chem. C, 2014, 118(20): 10651-10660.

[9] LI H Y, LI C, DUAN L, et al. Charge transport in amorphous organic semiconductors: Effects of disorder, carrier density, traps, and scatters[J]. Isr. J. Chem, 2014, 54(7): 918-926.

[10] NEAMEN D A. 半导体物理与器件[M]. 4版. 赵毅强, 姚素英, 史再峰, 等. 北京: 电子工业出版社, 2018.

[11] NOGUCHI Y, ISHII H, KIM H J, et al. Device properties of Alq3-based organic light-emitting diodes studied by displacement current measurement[J]. J. Photon. Energy,

2012, 2(1): 021214.

[12] ZHU X X, WANG Y C, JI W Y, et al. Unraveling the Turn-On Limitation of Quantum-Dot Electroluminescence via a Stepwise-Increasing Voltage Measurement[J]. Phys. Rev. Appl., 2023, 19(2): 4010.

[13] KWAK J, BAE W K, LEE D, et al. Bright and efficient full-color colloidal quantum dot light-emitting diodes using an inverted device structure[J]. Nano Lett., 2012, 12(5): 2362-2366.

[14] XU L, WANG J, HSU J W P. Transport effects on capacitance-frequency analysis for defect characterization in organic photovoltaic devices[J]. Phys. Rev. Appl., 2016, 6(6): 4020.

[15] WANG F F, HUA Q Z, JI W Y, et al. High-performance blue quantum-dot light-emitting diodes by alleviating electron trapping[J]. Adv. Opt. Mater., 2022, 10(13): 2200319.