arXiv:2302.07436v1 [cond-mat.mes-hall] 15 Feb 2023

Rashba 与德雷塞尔豪斯自旋轨道相互作用共存下半导体重空穴的非绝热贝里相位

Tatsuki Tojo* 和 Kyozaburo Takeda†理工学部，
早稻田大学，日本东京新宿，169-8555（日期：2023年2月16日）

摘要

我们为多能带系统构建了非阿贝尔贝里联络（张量 $\mathbb{R}$）和相位（矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}$），并将其应用于 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道相互作用共存时的半导体空穴。为此，我们重点研究受限于 $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 二维量子阱中的重有效质量空穴，并通过扩展的 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 方法探究其电子结构和自旋纹理。价带中的强子带间相互作用会导致布里渊区中心的 Γ 点之外出现准简并点。这些点作为奇点，在绝热过程中通过 π 的量子化改变阿贝尔贝里相位。为探究非绝热过程的影响，我们将时间依赖薛定谔方程与回旋运动的半经典运动方程相结合，沿等能面精确地计算 $\mathbb{R}$ 的围道积分，继而通过计算求出 $\boldsymbol{\Gamma}$ 的能量依赖性。除了具有类似狄拉克奇点的作用外，准简并点还会增强非绝热过程中的子带间跃迁。因此，非对角分量会同时出现在 $\mathbb{R}$ 和 $\boldsymbol{\Gamma}$ 中，而阿贝尔贝里相位中发现的简单 π 量子化不再成立。更有趣的是，这些非对角项会在准简并能量处引发“共振排斥”，并导致 $\boldsymbol{\Gamma}$ 的能量曲线出现不连续性。

I. 引言

半导体具有价带，其中包含三种子带：重有效质量空穴（重空穴，HHs）、轻有效质量空穴（轻空穴，LHs）和分裂空穴（SHs）。这些子带的存在会导致子带间相互作用（ISI），进而使价带呈现各向异性和非抛物性，并使这些子带在布里渊区（BZ）中出现准简并态。在准简并点附近，可以得到彼此正交的本征矢量，但由于“相位”不确定性，无法唯一确定这些本征矢量。此外，预计该点附近由德雷塞尔豪斯（体反演不对称性，BIA） [1] 和/或 Rashba（结构反演不对称性，SIA） [2]项引起的自旋轨道相互作用（SOI），会通过有效磁场的复杂分布产生特征性的自旋纹理

* tojo@qms.cache.waseda.ac.jp

† takeda@waseda.jp

[3–5]。因此，当这些准简并态具有类似于狄拉克奇点 [7]的 $\mathcal{E} - \boldsymbol{k}$ 结构时，有必要对半导体空穴进行 Berry分析 [6] 。

鉴于上述背景，我们研究了在结构反演不对称性和体反演不对称性自旋轨道相互作用共存条件下，受限于 $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 二维量子阱（2DQW）中的重空穴的贝里相位对能量和温度的依赖关系 [4, 5]。为研究 ISI，我们扩展了 Dres- selhaus、Kip 和 Kittel（以下简称 DKK） [8] $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ 微扰方法，纳入了 $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ 与自旋轨道相互作用项之间的二阶交叉，并确定了第 n 个布洛赫空穴（$|u_{\boldsymbol{k}}^n\rangle$）的周期部分。我们扩展后的 $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ 方法表明，准简并点类似于二维狄拉克奇点 [7]。沿 $\langle 110 \rangle$方向的这些点表现为类似“单极子”的奇点，而沿 $\langle \bar{1}10 \rangle$ 方向的点则表现为类似“偶极子”的奇点。因此，重空穴的贝里相位具有独特的、随能量变化的平台，并呈现 π 量子化。此外，通过统计布里渊区中的准简并点数量，同时辨认区域 [4, 5]内贝里曲率的符号，可以理解这种 π 量子化。

我们阐明，价带中的准简并态确实有可能充当狄拉克奇点。然而，我们的处理似乎有所偏颇，因为计算是在绝热过程中进行的。尽管准简并点使不同类型空穴之间的能量差很小，我们却忽略了子带间跃迁。我们应当考虑子带间杂化所引起的非绝热过程的影响。因此，我们在此为多能带系统构建非阿贝尔贝里联络（张量 $\mathbb{R}$）和相位（矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}$）（第 II 节）。一些开创性研究聚焦于贝里分析的非阿贝尔处理，深化了我们对相关问题的理解，尤其是在量子信息与计算领域 [9–13]。在此，我们针对半导体空穴这一实际课题构建了公式体系，虽未追求严格的数学形式，但希望将其应用于 Rashba 和 Dresselhaus自旋轨道相互作用共存时的半导体空穴（第 III 节）。我们聚焦于受限于 $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 2双量子阱（DQW）中的重空穴，并通过扩展的 $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ 方法探究其电子结构和自旋纹理（第 III A 小节）。随后，我们结合含时（TD）薛定谔方程与回旋运动的半经典运动方程，沿等能面忠实地进行 $\mathbb{R}$ 的围道积分，以计算 $\boldsymbol{\Gamma}$ 的能量依赖性（第 III B 小节）。

我们通过将能量划分为若干特征区域（如低能态区域和准简并点附近的态区域），研究了贝里相位的能量依赖性，并进一步探讨了非绝热过程的影响。

II. 非绝热过程的理论处理

A. 非阿贝尔贝里联络张量

贝里相位是波函数的相位差，当末态在由准确描述系统的参数所表征的特定运动过程中恰好回到初态时，可通过围道积分定义。由于我们研究的是具有布洛赫态的载流子的贝里相位，因此可以使用波矢 $\boldsymbol{k}$ 作为准确描述系统的参数。我们将第 n 个布洛赫本征态的周期部分定义为 $|u_{\boldsymbol{k}}^n\rangle$。因此，由于在 $\boldsymbol{k}$处的完备性，载流子的任意态 $|\phi_{\boldsymbol{k}}\rangle$ 都可表示为 $|u_{\boldsymbol{k}}^n\rangle$ 的展开：

$$|\phi_{\boldsymbol{k}}\rangle = \sum_n c_{\boldsymbol{k}}^n |u_{\boldsymbol{k}}^n\rangle , \tag{1}$$

其中， n 包含自旋极化。

现在，我们探讨这样一条 $\boldsymbol{k}$ 空间轨迹：其末态 $\boldsymbol{k}_f$ 完全回到初态 $\boldsymbol{k}_i$。等能面是这条轨迹的代表，而“回旋运动”则实现了这条轨迹。因此，我们通过回旋运动重现载流子的“动力学”过程，其时间依赖特征由半经典运动方程描述。通过将半经典运动方程与含时薛定谔方程相结合，这种回旋运动的重现使我们能够求解波矢的时间依赖性。因此，尽管波矢 $\boldsymbol{k}$ 本身本质上与时间无关，我们仍能在方程（1）的投影系数 $c_{\boldsymbol{k}}^n$ 中显式纳入时间依赖性。此外，回旋运动过程中的能量守恒带来以下物理认识：绝热过程具体决定了单一本征态$|u_{\boldsymbol{k}}^n\rangle$的等能面。因此，具有 $\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k}_f$ 的闭合轨迹由单周期运动自然且唯一地确定。相反，非绝热过程允许载流子发生态间杂化，即使是在沿能量守恒的 $\boldsymbol{k}$ 空间轨迹进行回旋运动期间也是如此。由此产生的 $\boldsymbol{k}$ 空间轨迹无法用单一等能面表示

该特定本征态的等能面；然而，由于载流子在多个态之间往返运动，这条轨迹可由多个等能面合成表示。因此，非绝热过程中的单周期回旋运动并不总是使末态波矢 $\boldsymbol{k}_f$ 与初态波矢 $\boldsymbol{k}_i$ 相等。要形成 $\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k}_f$ 的闭合轨迹，可能需要多周期回旋运动。

利用方程（1），我们将含时薛定谔方程改写如下：

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left|\phi_{\boldsymbol{k}}(t)\right\rangle = \hat{\mathcal{H}}_{\boldsymbol{k}}\left|\phi_{\boldsymbol{k}}(t)\right\rangle, \tag{2}$$

为如下速率方程：

$$\begin{aligned}\frac{dc_{\boldsymbol{k}}^{m}}{dt} &= -\sum_{m'}\left(\sum_{\xi}\left\langle u_{\boldsymbol{k}}^{m}\left|\frac{\partial u_{\boldsymbol{k}}^{m'}}{\partial k_\xi}\right.\right\rangle\frac{dk_\xi}{dt}\right)c_{\boldsymbol{k}}^{m'} - i\frac{E_{\boldsymbol{k}}^{m}}{\hbar}c_{\boldsymbol{k}}^{m} \\ &= i\sum_{m'}\left(\sum_{\xi}\mathbb{R}_{mm'}^{\xi}(\boldsymbol{k})\ \dot{k}_\xi\right)c_{\boldsymbol{k}}^{m'} - i\frac{E_{\boldsymbol{k}}^{m}}{\hbar}c_{\boldsymbol{k}}^{m}.\end{aligned} \tag{3}$$

在此，我们将张量分量 $\mathbb{R}_{mm'}^{\xi}(\boldsymbol{k})$ 定义如下：

$$\mathbb{R}_{mm'}^{\xi}(\boldsymbol{k}) = i\left\langle u_{\boldsymbol{k}}^{m}\left|\frac{\partial u_{\boldsymbol{k}}^{m'}}{\partial k_\xi}\right.\right\rangle. \tag{4}$$

由于本文聚焦于二维系统，我们只关注面内分量 $\xi = x$和 y。这一处理并未削弱公式（4）的一般性。

由方程（4）定义的张量 $\mathbb{R}_{mm'}^{\xi}(\boldsymbol{k})$ 在数学上等价于贝里联络张量。从物理上讲，该张量是非绝热过程 [9, 14] 中的非阿贝尔贝里联络，因为它考虑了 $|u_{\boldsymbol{k}}^{m}\rangle$ 和 $|u_{\boldsymbol{k}}^{m'}\rangle$之间的态间杂化。非阿贝尔贝里联络张量的非对易性在贝里相位矩阵计算中的时间序乘积里显式体现。

方程（4）的对角项（$m' = m$）如下：

$$\mathbb{R}_{mm}^{\xi}(\boldsymbol{k}) = i\left\langle u_{\boldsymbol{k}}^{m}\left|\frac{\partial u_{\boldsymbol{k}}^{m}}{\partial k_\xi}\right.\right\rangle \equiv A_{m}^{\xi}(\boldsymbol{k}). \tag{5}$$

符号 $A_{m}^{\xi}(\boldsymbol{k})$ 是第 m 个载流子的阿贝尔贝里联络矢量 $\boldsymbol{A}_m(\boldsymbol{k})$ 的 ξ 分量，其表达式为

$$\boldsymbol{A}_m(\boldsymbol{k}) = i\left\langle u_{\boldsymbol{k}}^{m}\right|\nabla_{\boldsymbol{k}}\left|u_{\boldsymbol{k}}^{m}\right\rangle. \tag{6}$$

B. 非阿贝尔贝里相位矩阵

为了从 $\mathbb{R}^{\xi}_{mm'}(\boldsymbol{k})$ 中消除动力学相位，我们进一步将有理化贝里联络张量 $\bar{\mathbb{R}}^{\xi}(\boldsymbol{k})$ 重新定义如下：

$$\bar{\mathbb{R}}^{\xi}(\boldsymbol{k}) = \left(\exp\left[i\int_0^t \boldsymbol{\Xi}_{\boldsymbol{k}(t')}dt'/\hbar\right]\right)\mathbb{R}^{\xi}(\boldsymbol{k})\left(\exp\left[-i\int_0^t \boldsymbol{\Xi}_{\boldsymbol{k}(t')}dt'/\hbar\right]\right). \tag{7}$$

这里，我们引入能量本征值矩阵 $\boldsymbol{\Xi}_{\boldsymbol{k}}$，其对角元即为布洛赫本征态的能量本征值：

$$\boldsymbol{\Xi}_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} E^1_{\boldsymbol{k}} & & 0 \\ & E^2_{\boldsymbol{k}} & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}. \tag{8}$$

相应地，当终点 $\boldsymbol{k}_f(E)$（$t = T_{\mathrm{cls}}$）通过以下方式完全返回到起点 $\boldsymbol{k}_i(E)$（$t = 0$）时，我们得到非阿贝尔贝里相位矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}(E)$：

$$\boldsymbol{\Gamma}(E) = -i\ln\left(\mathcal{T}\exp\left[i\sum_{\xi}\int_0^{T_c}\bar{\mathbb{R}}^{\xi}\,\dot{k}_{\xi}(E)dt\right]\right) = -i\ln\left(\mathcal{T}\exp\left[i\sum_{\xi}\int_{\boldsymbol{k}_i(E)}^{\boldsymbol{k}_f(E)}\bar{\mathbb{R}}^{\xi}\,dk_{\xi}(E)\right]\right). \tag{9}$$

这里，我们用符号 $\dot{\boldsymbol{k}}(=d\boldsymbol{k}/dt)$ 表示波矢 $\boldsymbol{k}$ 对时间的导数。考虑到贝里联络张量 $\bar{\mathbb{R}}^{\xi}(\boldsymbol{k}(E))$ 的非对易性，我们还使用时间序乘积 $\mathcal{T}$。

如果系统可以用绝热近似很好地描述，则合理化贝里联络 $\mathbb{R}$ 的非对角元（非对易）可以忽略，从而得到对角贝里联络 $\boldsymbol{R}_m(=\boldsymbol{A}_m)$。相应地，任意时刻的 $\mathbb{R}$ 都是可对易的，时间序乘积仅抵消式（9）中的数学运算“ln”和“exp”。因此，斯托克斯定理将围道积分转换为曲面积分，如下所示：

$$\boldsymbol{\Gamma} = -i\ln\left(\exp\left[i\int_{\boldsymbol{k}_i(E)}^{\boldsymbol{k}_f(E)}\bar{\mathbb{R}}\cdot d\boldsymbol{k}(E)\right]\right) \Rightarrow \oint_E \boldsymbol{R}\cdot d\boldsymbol{k} = \iint_{\leq E}\nabla\times\boldsymbol{R}\,dk_xdk_y. \tag{10}$$

C. 回旋运动

因此，要计算非阿贝尔贝里相位，我们必须对方程中的等值线积分进行围道积分，(9) 并特别注意非阿贝尔贝里联络的非对易性所导致的时间序乘积

。除了这一点，我们还需要描述波矢的时间依赖性，因为被积函数中含有 $\boldsymbol{k}$这一项。为消除自旋简并而施加的磁场 $\boldsymbol{B}_0 = (0, 0, B_0)$会引发“回旋运动”，据此我们可以重现波矢沿 $\boldsymbol{k}$ 轨迹的运动。半经典运动方程将这一时间依赖特征描述如下：

$$\frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = \frac{q}{\hbar^2}\langle\phi_{\boldsymbol{k}}|\,\nabla_{\boldsymbol{k}}\hat{\mathcal{H}}_{\boldsymbol{k}}\,|\phi_{\boldsymbol{k}}\rangle \times \boldsymbol{B}_0. \tag{11}$$

因此，通过结合方程（3）和（11），并考虑方程（9）中的时间序乘积，我们能够沿着回旋 $\boldsymbol{k}$轨迹准确地计算围道积分。

III. 应用于 $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 二元合金体系

A. 扩展的 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 方法与准简并态

我们通过考虑 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 与自旋轨道相互作用耦合之间截至二阶（2nd）项的交叉，对 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 方法进行了扩展，以研究Rashba和Dresselhaus自旋轨道相互作用竞争系统 [4, 5] 的自旋纹理。扩展的 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 方法确定了周期部分$|u^n_{\boldsymbol{k}}\rangle$ 和本征能量$E^n_{\boldsymbol{k}}$ ，并精确地考虑了第 n 个布洛赫空穴$|\varphi^n_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\rangle = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,|u^n_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\rangle$的ISI：

$$\hat{\mathcal{H}}^{\mathrm{exd}}_{\boldsymbol{k}}\,|u^n_{\boldsymbol{k}}\rangle = \left(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}'_{\boldsymbol{k}} + \mu_B\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}_0\right)|u^n_{\boldsymbol{k}}\rangle = \left(E^n_{\boldsymbol{k}} - \frac{\hbar^2}{2m}k^2\right)|u^n_{\boldsymbol{k}}\rangle \equiv \mathcal{E}^n_{\boldsymbol{k}}\,|u^n_{\boldsymbol{k}}\rangle\,. \tag{12}$$

ˆ ˆ 这里， $\mathcal{H}_0$ 是未扰动哈密顿量，而 $\mathcal{H}'_{\boldsymbol{k}}$ 是扩展的 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 哈密顿量，其形式为

$$\hat{\mathcal{H}}'_{\boldsymbol{k}} = \hat{\mathcal{H}}'_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}} + \hat{\mathcal{H}}'_{\mathrm{cSOI}} + \hat{\mathcal{H}}'_{\mathrm{SIA}\boldsymbol{k}} + \hat{\mathcal{H}}'_{\mathrm{SIA}\boldsymbol{p}\otimes\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}} + \hat{\mathcal{H}}'_{\mathrm{BIA}\boldsymbol{k}} + \hat{\mathcal{H}}'_{\mathrm{BIA}\boldsymbol{p}\otimes\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}}. \tag{13}$$

ˆ在此， $\mathcal{H}'_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}}$ 是由ˆDKK [8], 引入的传统二阶 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰哈密顿量，而 $\mathcal{H}'_{\mathrm{cSOI}}$ 则是由晶体势引起的内部自旋轨道相互作用微扰项（对应于所谓的 $\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{s}$）。式（13）中的其余四项对应于与结构反演不对称性和体反演不对称性相关的自旋轨道相互作用项，定义见我们之前的工作 [15, 16]。

在电子结构计算中，假设空穴被限制在 $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 二元合金系统中，该系统具有交替排列的结构，此时体反演不对称性最

强。我们进一步假设二维量子阱系统由 41 个原子层构成，其厚度符合实际情况，并能再现上述体反演不对称性的影响。我们施加垂直于 (001) 量子平面的 Rashba电场（$\Xi_0 = 1.04 \times 10^3$ [m/s]），以研究结构反演不对称性与体反演不对称性共存系统 [5, 17–20]。此外，我们施加一个垂直于量子平面的极弱磁场（4.7 mT）。该磁场很弱，几乎不会改变电子结构和自旋纹理，使其与零磁场下的情况基本相同，但它会解除点 Γ（布里渊区中心）以及准简并点（$\langle 110 \rangle$ 和 $\langle \bar{1}10 \rangle$）处的简并，从而使其呈现有质量狄拉克费米子的特征。

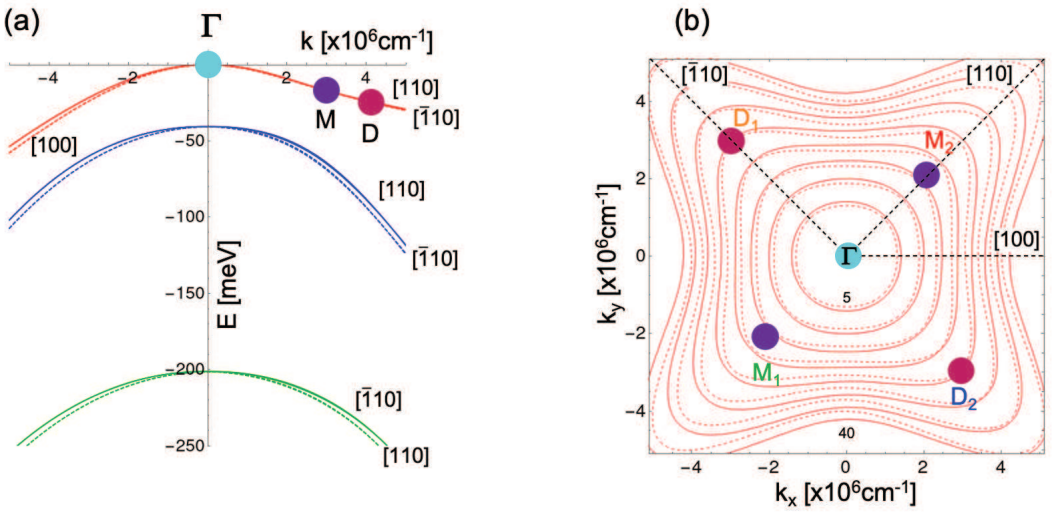

图 1. 由 $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 交替合金构成的二维量子阱系统的 $\mathcal{E} - \boldsymbol{k}$ 色散关系 (a) 和等能线 (b)。该系统具有 (001) 量子平面，且结构反演不对称性与体反演不对称耦合强度相等。重空穴、轻空穴和分裂空穴的 $\mathcal{E} - \boldsymbol{k}$ 色散关系分别以红色、蓝色和绿色表示；实线表示具有稳定自旋 (+) 的态，虚线则表示具有不稳定自旋 (–) 的态。图中给出了重空穴的等能线，能量间隔为 5 meV (b)。图中的彩色圆圈标示了重空穴之间的准简并点。所有 $\mathcal{E} - \boldsymbol{k}$ 色散关系 (a) 和等能面 (b) 均为二维量子化下基态的结果。

图1(a)展示了在 SIA-BIA 共存 [4]条件下，$Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 2DQW 系统中受限重空穴、轻空穴和分裂空穴的合成 $\mathcal{E}-\boldsymbol{k}$ 色散关系。由于 Rashba 和德雷塞尔豪斯耦合引起的自旋轨道相互作用会稳定(+)/ destabilize(–)各类空穴（重空穴、

轻空穴和分裂空穴），我们用实线/虚线将它们区分开来。随后，我们在图1(b)中展示相应的重空穴± 等能线。ISI 会导致重空穴± 在 $\langle 110\rangle$ 方向上呈现强烈的各向异性和非抛物性，使它们之间产生准简并，这一点如图1(b)所示。系统的 C_2 对称性导致出现两对准简并点： $[\bar{1}\bar{1}0]$和 $[110]$ 方向上的 M_1 和 M_2 ，以及 $[1\bar{1}0]$ 和 $[\bar{1}10]$ 方向上的 D_1 和 D_2 。正如我们在先前的研究 [4, 5], 中所报告的，前一对准简并点 M 充当“单极子”奇点，而后一对 D 则充当“偶极子”奇点。

B. 非阿贝尔贝里相位

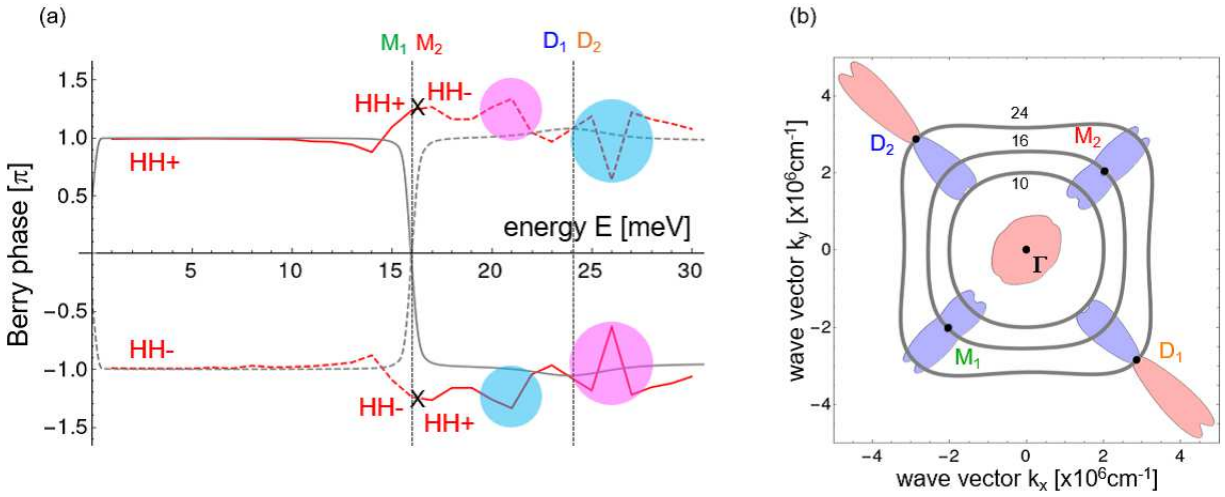

图2. 超越绝热近似（a）时 HH+ 和 HH− 的非阿贝尔贝里相位的能量依赖性。作为比较，我们叠加了相应的阿贝尔贝里相位的能量依赖性（灰线）。利用斯托克斯定理，我们可以通过对 HH+ 的阿贝尔贝里曲率进行曲面积分来计算阿贝尔贝里相位，其分布如图（ b ）所示。

通过采用非阿贝尔贝里联络 $\mathbb{R}$，我们探究绝热过程之外 HH± 的贝里相位 $\mathbf{\Gamma}$ 对能量的依赖性。对式 (12) 进行对角化后，我们预先存储本征态 $|u^n_{\boldsymbol{k}}\rangle$ 和 $E^n_{\boldsymbol{k}}$ 。随后，随着时间推进，在每个 $\boldsymbol{k}(t)$ 处调用并使用它们进行数值计算。将回旋运动的半经典运动方程 (11) 与速率

方程 (3) 结合后，我们可以将 TD 回旋运动改写为 $\boldsymbol{k}$ 空间轨迹，并隐式地引入沿轨迹变化的本征矢量的时间依赖性。在计算中，我们将所研究空穴 $|\phi_{\boldsymbol{k}}\rangle$ 的初态设为具有 $\boldsymbol{k}_i^{\mathrm{HH}+} = (k_i^{\mathrm{HH}+}, 0)$ 的 HH+ 本征态，并在能量守恒条件下沿 $\boldsymbol{k}$ 空间的回旋轨迹进行围道积分。式 (9) 积分中的时间序乘积采用 Crank-Nicolson算法计算。在实际计算中，我们将 $\boldsymbol{k}$ 空间划分为长度为 $dk \sim 1 \times 10^{3}\mathrm{cm}^{-1}$ 的线元。因此，沿等能面（例如 $E = 10$ 毫电子伏特）的时间序乘积需要计算 13,550,000 步。我们执行了当前数值计算，并将误差控制在总能量的 1×10^{-9} % 以内，以确认“回旋运动”过程中的能量守恒。由于非阿贝尔贝里相位 $\boldsymbol{\Gamma}$ （式 (9)）具有矩阵形式，我们对其进行对角化，并根据包含自旋的分量 $|yz\rangle$、$|zx\rangle$ 和 $|xy\rangle$，识别 HH±、LH± 和 SH± 的本征值。

图2(a)展示了本征值 $\gamma_{\mathrm{HH}\pm}(E)$ 随能量的变化。实线（红色）表示 HH+ 的能量依赖性，虚线（红色）则表示 HH− 的能量依赖性。与其他半导体类似，本 $\mathrm{Si}_{0.5}\mathrm{Ge}_{0.5}$ 2 DQW 系统在点 Γ 存在一个有质量狄拉克奇点，而 $\pm\pi$ 的贝里相位会导致 HH±，无论是绝热过程还是非绝热过程均如此。图2(a)表明，HH± 的非阿贝尔贝里相位 $\gamma(E)$ 在趋近价带顶时也会收敛至 $\pm\pi$。由于绝热过程中的阿贝尔贝里相位由有质量/无质量狄拉克点的奇点决定，HH± 会保持值 $\pm\pi$，直到准简并点 M_1 和 M_2 新出现。在能量低于 ~ 12 毫电子伏特的低能区域，非绝热过程几乎不会改变 $\gamma(E)$ 中的能量依赖性，与绝热过程中的情况相同；也就是说，非绝热过程会产生类似的平台形态，其值为 $\gamma_{\mathrm{HH}\pm}(E) = \pm\pi$。然而，在约 16 毫电子伏特处，非绝热过程出乎意料地改变了贝里相位的符号，并通过相互交换使 $\gamma(E)$ 出现不连续性。这与绝热过程中贝里相位符号发生突然而连续的变化截然不同。还需注意，非绝热过程会在 21 和 26 毫电子伏特附近产生特征性的“起伏”形态，这不同于绝热过程中的平坦形态（$\gamma = \mp\pi$）。

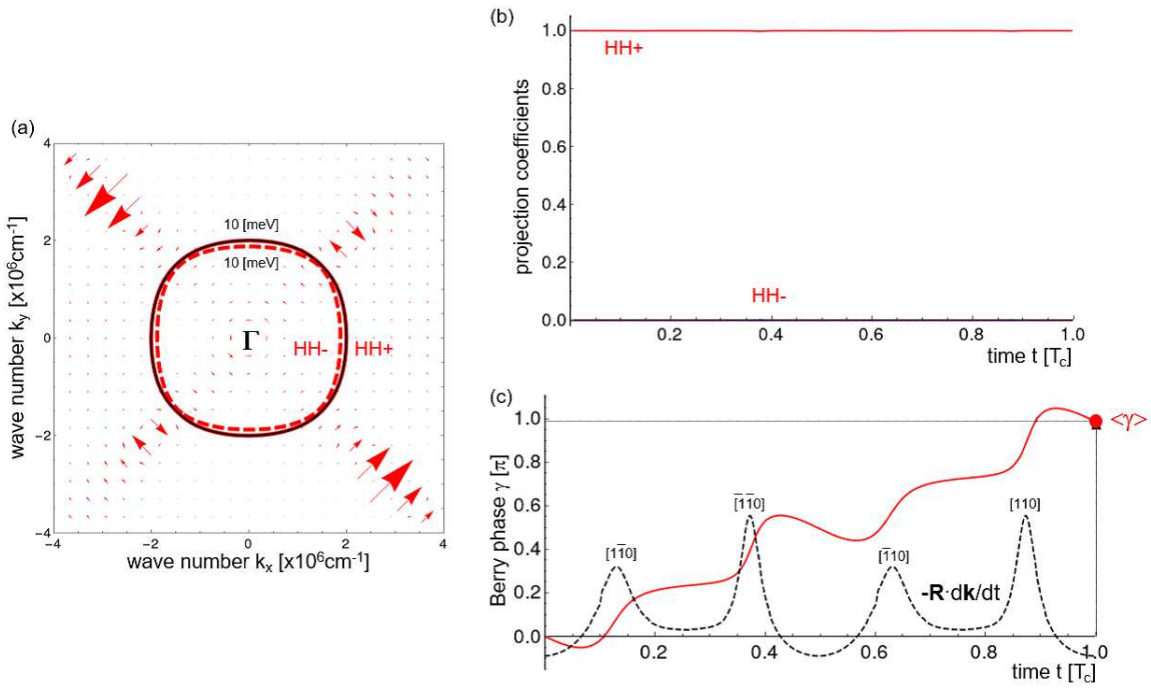

图 3. 能量为 10 毫电子伏特的空穴的 $\boldsymbol{k}$ 空间轨迹（黑色实线）（a）。我们展示了 HH+ 的非阿贝尔贝里联络矢量场分布（红色箭头），以及 HH+ （红色实线）和 HH− （红色虚线）的等能面（10 毫电子伏特）。我们展示了投影分布（b），以及 $\mathbb{R}$ 与 $\boldsymbol{k}$ 之间内积 $-\mathbf{R}\cdot\dot{\mathbf{k}}$（黑色虚线）的逐次积分值（红线）（c）。

在低能区域

我们首先考察最高至 ~ 10 毫电子伏特的非阿贝尔贝里相位 $\gamma(E)$。图 3(a)展示了面内贝里联络的矢量场。我们还展示了回旋运动的 $\boldsymbol{k}$ 轨迹，并叠加了 HH$\pm$ 在 10 毫电子伏特处的等能面。回旋运动轨迹与 HH+ 的等能面完全重合。此外，经过单周期运动，空穴的最终位置 $\boldsymbol{k}_f$ 准确返回初始位置 $\boldsymbol{k}_i$。投影分析表明，空穴 $|\phi_{\boldsymbol{k}}\rangle$ 主要由 HH+ 构成，即使在回旋运动期间经历非绝热过程，也只有较少的态发生杂化。因此， $\boldsymbol{k}$ 空间轨迹与 10 毫电子伏特处 HH+ 的等能面重合（图 3(b)）。

图 3(c) 展示了以下两者内积的连续积分（红线）：

贝里联络 $\mathbb{R}$ 与波矢 $\boldsymbol{k}$的时间导数。我们沿回旋轨迹逐步积分，直到时间 t。除完整的围道积分外，中途的任何数值都随规范变换而改变，在物理上没有意义。然而，这些“中途”积分很好地说明了贝里相位的确定过程。图 3(a) 展示了非阿贝尔贝里联络在 $\langle 110\rangle$ 和 $\langle 1\bar{1}0\rangle$方向上产生较大数值。此外，这些联络矢量与能量为 10 meV 的空穴的回旋方向反平行。因此，每当空穴经过这四个方向时，$\mathbb{R}$ 与 $\boldsymbol{k}$ 之间的余弦值便逐步增大（图 3(c) 中的虚线）。除上述四个方向外，贝里联络矢量本身的值都很小，因此得到的内积也很小。还应注意，该系统具有 C_2旋转对称性，因此当时间经过半个周期时间 T_c（$= T_{\mathrm{cls}}/N_{\mathrm{cyc}}$）时，空穴会在“积分”后的轮廓上重复相同的 TD 轮廓；其中，T_{cls} 和 $N_{\mathrm{cyc}} = 1$ 分别为形成闭合轨迹（$\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k}_f$）所需的时间和周期。如此一来，非绝热过程中的空穴会经历这些复杂的规范变换过程。尽管如此，通过围道积分确定的非阿贝尔贝里相位 γ 有趣地与绝热过程下的数值一致。也就是说，能量不超过 $\sim$12 meV 的 HH+ （和 HH−）的贝里相位可以由绝热近似很好地描述。

关于单极点 M

我们探讨了空穴经过准简并点 M_1 和 M_2时，非阿贝尔贝里相位所受到的影响。为此，我们令空穴初始处于能量为 16 毫电子伏特的 HH+本征态。所得的 $\boldsymbol{k}$ 轨迹和投影系数分别如图 4(a) 和 (b) 所示。由于空穴初始处于 HH+本征态，空穴首先沿着与 HH+ 的等能面相同的 $\boldsymbol{k}$ 轨迹运动（红色实线）。图 4(b) 表明，当空穴经过 M_1点时，它会从 HH+ 完全跃迁至 HH−。相应地，空穴的轨迹会从 HH+ 的等能面（红色实线）变为 HH− 的等能面（红色虚线）。系统的 C_2 对称性进一步导致空穴在准简并点 M_2处跃迁回 HH+ 。因此，轨迹返回 HH+的等能面，并且在单个回旋周期内不可避免地产生具有 $\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k}_f$ 的闭合轨迹。于是，空穴每次经过

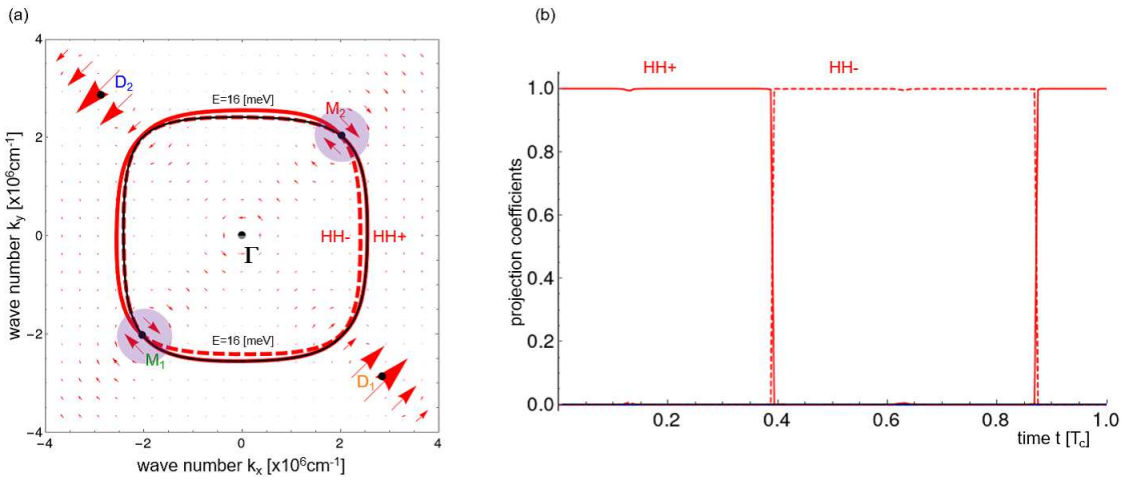

图 4. 能量为 16 毫电子伏特的空穴在 $\boldsymbol{k}$-空间中的轨迹（黑色实线）、非阿贝尔贝里联络的矢量场分布（红色箭头），以及 HH+ （红色实线）和 HH− （红色虚线）的等能面（16 毫电子伏特）（a）。图中还展示了投影系数 $|c_{\boldsymbol{k}}^{m}|^2$ 随时间的变化（b）。

“单极子”点 M_1 和 M_2, 时，都会在 HH± 的两个等能面之间完全交替跃迁；由于能量守恒，它在回旋运动过程中会在这两个等能面之间来回运动。

非绝热过程允许发生态间跃迁，进而引发非对角项 $\mathbb{R}^{\xi}_{mm'}(\boldsymbol{k})$。因此，如图4(a)所示，非阿贝尔贝里联络矢量在准简并点 M 处呈现出具有涡旋且方向相反的特征分布。这个非对角贝里联络元$\mathbb{R}^{\xi}_{mm'}(\boldsymbol{k})$进一步引发非阿贝尔贝里相位矩阵 $\mathbf{\Gamma}$中的非对角项。图5展示了准简并点 M 附近 HH± 的 $\mathbf{\Gamma}$ 对角元 (a) 和非对角元 (b) 的能量依赖性。对角元的绝对值逐渐减小，并在 M 点变为零。随后，这些对角项相互交叉并增大。这些对角元的能量曲线与阿贝尔贝里相位相似；在阿贝尔贝里相位中，绝热过程会抑制态间杂化（图5(a)）。相比之下，非绝热过程使非对角项在 M 点达到最大值（图5(b)）。也就是说，M 点处贝里相位的相互交叉，由非绝热过程中态间跃迁所引发的非对角元转变为“避免交叉”。这种“共振排斥”导致准简并点 M 处 HH± 的非阿贝尔贝里相位出现不连续性（图2(a)）。此外，

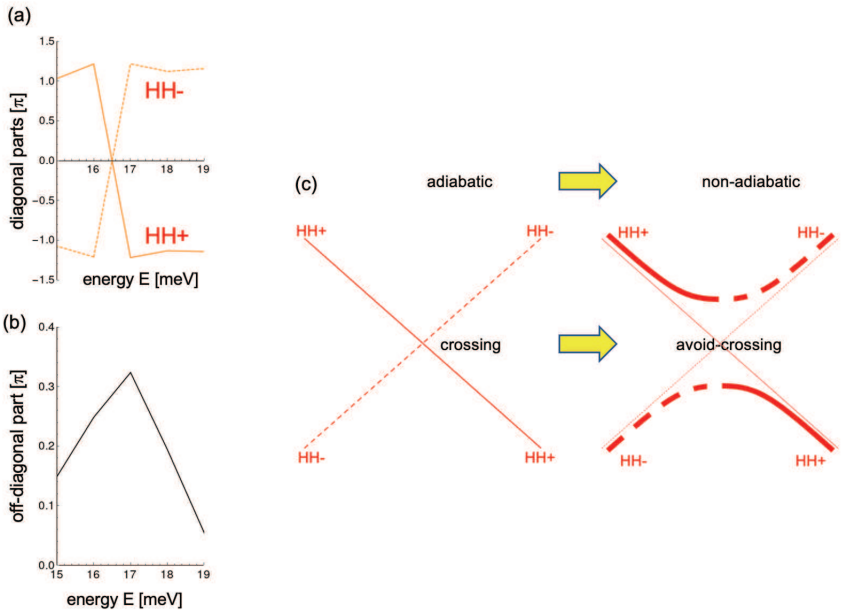

图5. HH± 绕准简并点 M 的非阿贝尔贝里相位矩阵的能量依赖性；对角元 (a) 和非对角元 (b)。准简并点 M 附近非阿贝尔贝里相位能量依赖性中不连续性的示意解释 (c)。

态间跃迁打破了严格的 π量子化。

当回旋轨迹仅与 M 点相距一段距离时，会发生什么？图6展示了能量为 15 毫电子伏特的空穴的 $\boldsymbol{k}$ 轨迹 (a)、投影系数 (b) 及其傅里叶分析 (c)。与 M 点相距越远，HH± ($\Delta E^{\pm}$) 之间的能量差就越大。因此，HH±之间的态间跃迁减弱（图6(b) 和 (c)）。尽管如此， $\boldsymbol{k}$ 轨迹 (a) 是由能量为 15 毫电子伏特的 HH+ 和 HH− 的等能面根据杂化比合成形成的。非绝热过程导致这种复杂的态间跃迁，并且需要 80 个回旋周期才能闭合轨迹（$\boldsymbol{k}_f(E) = \boldsymbol{k}_i(E)$）。

我们假设闭合轨迹（$\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k}_f$）的形成需要经历 N_{cyc} 个周期以及时间 T_{cls}。于是，我们通过 $T_c = T_{\mathrm{cls}}/N_{\mathrm{cyc}}$和 $\omega_c = N_{\mathrm{cyc}} \cdot \omega_{\mathrm{cls}}$得到准回旋周期和准回旋频率，其中符号 $\omega_{\mathrm{cls}} = 2\pi/T_{\mathrm{cls}}$ 表示基频。因此，第 l个谐波的频率为 $\omega_l = l \cdot \omega_{\mathrm{cls}}$，相对于

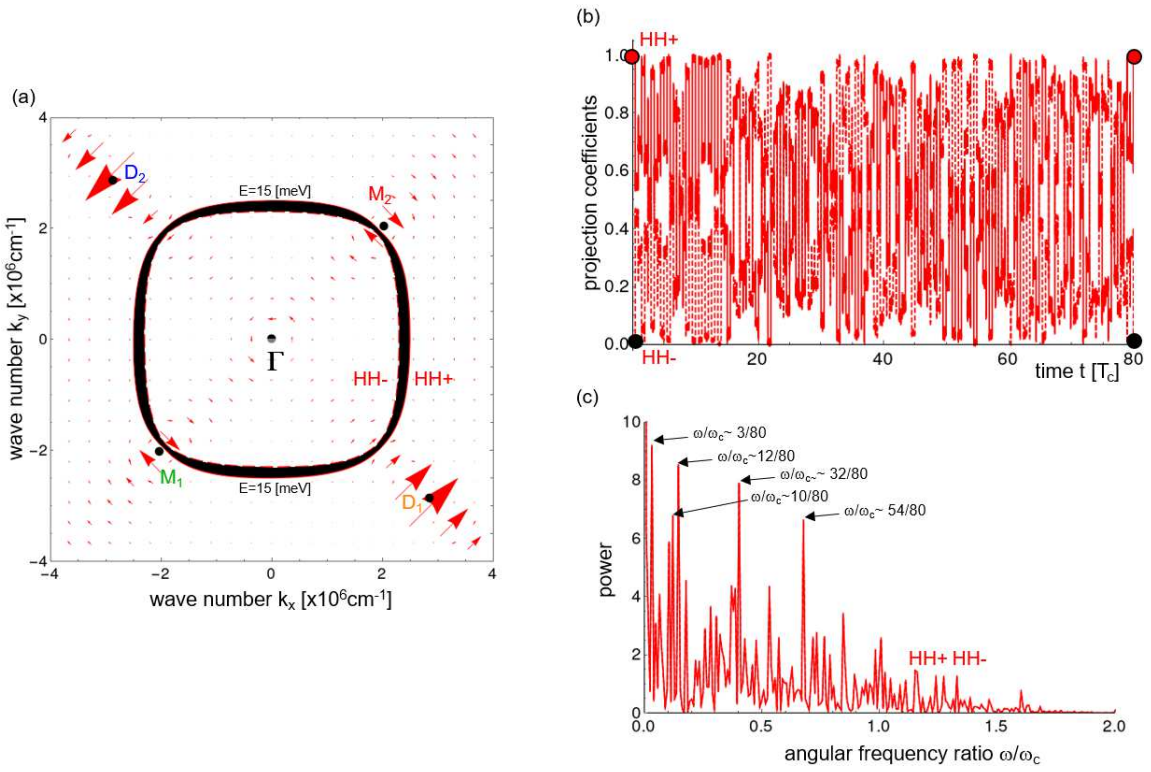

图 6。能量为 15 毫电子伏特、与准简并能量相差 1 毫电子伏特的空穴的 $\boldsymbol{k}$-空间轨迹（黑色实线）（a）。我们叠加绘制了非阿贝尔贝里联络的矢量场分布（红色箭头），以及 HH+ （红色实线）和 HH− （红色虚线）的等能面（15 毫电子伏特）。我们展示了投影系数 $|c_{\boldsymbol{k}}^{m}|^2$ 随时间的变化（b）及其傅里叶分量（c）。

准回旋频率的频率比为有理数，表示为，

$$\frac{\omega_l}{\omega_c} = \frac{l}{N_{\mathrm{cyc}}}.$$

傅里叶分析（图 6(c)）表明，所有峰值都可表示为分母为 80 的有理数。

关于偶极点 D

我们进一步探究了空穴经过约 24 毫电子伏特处的其他准简并点 D_1 和 D_2 时的 $\boldsymbol{k}$ 轨迹（a）及投影分布（b）（图 7）。尽管点 D_1, 处 HH± 态之间的能量差很小，但向 HH− 态的跃迁并不

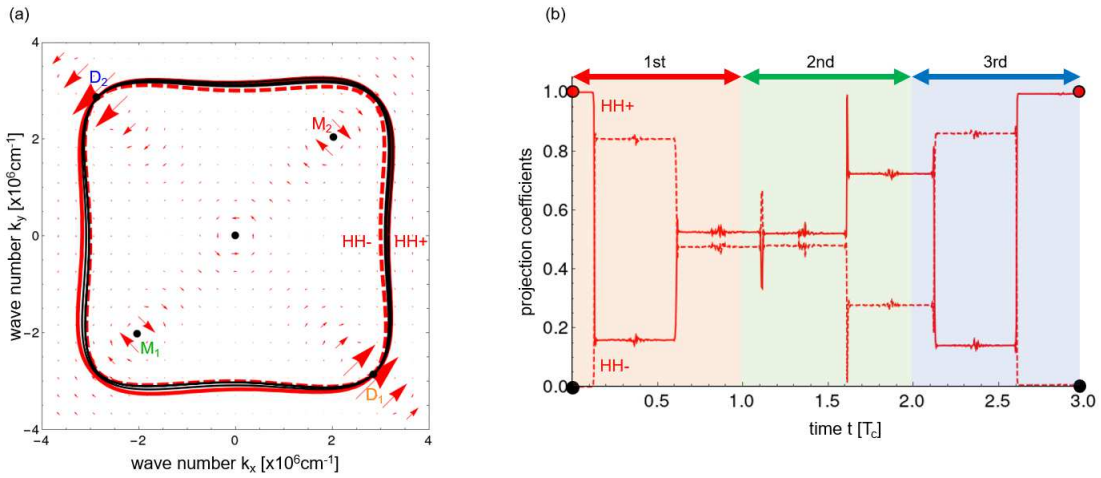

图 7. 空穴的 $\boldsymbol{k}$ 空间轨迹（黑色实线），其准简并能量为 24 毫电子伏特，并叠加了非阿贝尔贝里联络矢量场（红色箭头）以及 HH+ （红色实线）和 HH− （红色虚线）的等能量面（24 毫电子伏特）（a）。我们展示了投影系数 $|c_{\boldsymbol{k}}^{m}|^2$ 随时间的变化（b）。我们分别用红色、绿色和蓝色表示第一、第二和第三个周期。

完全，这不同于 M_1点处的情况。投影分布进一步表明，在回旋运动过程中，空穴同时包含 HH± 的两种态。因此，所得轨迹位于 HH+ 和 HH−的等能面之间；例如，从第二个周期中的 D_1 点到 D_2 点，空穴在 HH±之间的杂化比例几乎相等，而轨迹位于两个 HH± 等能面的中间位置。当空穴经过 D_2, 点时，向 HH+ 的不完全跃迁使空穴无法将其轨迹返回到 HH+的等能面。因此，回旋轨迹无法通过单个周期闭合，需要经过多个周期，即三个周期。

我们重新考察了“偶极子”状奇点 D 附近的阿贝尔贝里曲率分布（图 8(a)）。在 $[1\bar{1}0]$ 方向上，我们发现负曲率的最低点位于 22.4 毫电子伏特，而正曲率的最高点位于 25.4 毫电子伏特。我们对图 8(a) 中所示等值线包围的曲率进行曲面积分；负面积的值为 -0.04π，正面积为 0.05π。因此， -0.04π 和 0.05π 的这些数值相互抵消，使得点 D 上的曲面积分为零，呈现出“偶极子”状特征。因此，这个减弱的奇点导致了该非阿贝尔贝里相位的“凸起和凹陷”，

在图2(a)中，这些非阿贝尔贝里相位出现在约 21 和 25 毫电子伏特处。相比之下，点 Γ 和 M 点周围相应的曲面积分值分别为 0.998π 和-0.986π，这些点起到狄拉克奇点的作用。

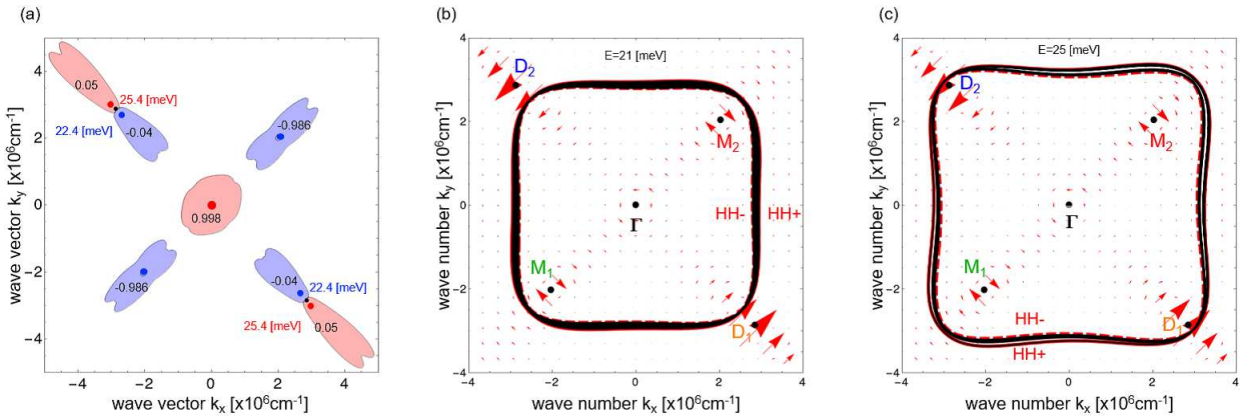

图 8. HH+ 的$\boldsymbol{k}$空间阿贝尔贝里曲率分布 (a)，以及准简并能量为 21 毫电子伏特 (b) 和 25 毫电子伏特 (c) 的空穴所对应的回旋轨迹（黑色实线）。我们在 (a) 中展示了 ± 0.001 的阿贝尔贝里曲率等值线，并在 (b) 和 (c) 中叠加绘出非阿贝尔贝里联络的矢量场（红色箭头）以及 HH+ （红色实线）和 HH− （红色虚线）的等能面。

我们在图 8(b) 和 (c) 中展示了能量为 21 和 25 毫电子伏特的 $\boldsymbol{k}$ 轨迹。需要注意的是，由于完全交替跃迁，经过类“磁单极子”点 M 的回旋运动只需一个或几个周期便可闭合回旋轨迹。然而，上述负值 (21 毫电子伏特) 和正值 (25 毫电子伏特) 极小点偏离了 D 点，且 HH$\pm$ 之间的能量差增大。因此，由于这两个态之间的态间跃迁减少，空穴的 TD 分量既不会完全互换，也不会交替互换。因此，轨迹闭合需要多次回旋运动，分别需要 19 次 (b) 和 7 次 (c)。

IV. 总结

我们为多能带系统构建了非阿贝尔贝里联络张量 $\mathbb{R}$ 和相位矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}$，并将其应用于 Rashba 和德雷塞尔豪斯自旋轨道相互作用共存时的半导体空穴。随后，我们通过计算研究了 $\boldsymbol{\Gamma}$的能量依赖性，

重点关注限制在 $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 2DQW 中的重空穴。我们结合 TD Schr¨odinger 方程与描述回旋运动的半经典运动方程，沿等能面计算了 $\mathbb{R}$ 的围道积分。

ISI在半导体价带中导致多个准简并态。这些准简并点充当狄拉克奇点，并使绝热过程中贝里相位的能量依赖性出现 π 量子化。非绝热过程会诱导子带间杂化，使 $\mathbb{R}$ 和$\mathbf{\Gamma}$中的非对角元在准简并点附近尤为显著地增大。因此，贝里相位中简单的 π量子化遭到破坏。更有趣的是，HH$\pm$ 的非阿贝尔贝里相位在M点的准简并能量处相互交换。因此，HH$\pm$的 $\mathbf{\Gamma}$能量依赖性存在不连续性。这种交换与不连续现象可以用非绝热过程解释：该过程会产生非对角项，并形成“共振排斥”。

附录A：非阿贝尔贝里曲率

利用式（4）的二维非阿贝尔贝里联络张量 $\mathbb{R}^{\xi}_{mm'}$，非阿贝尔贝里曲率矩阵$\Omega^{z}_{mm'}$ 的面外分量为

$$\begin{aligned}\Omega^{z}_{mm'}(\boldsymbol{k}) &= \left[\nabla_{\boldsymbol{k}} \times \mathbb{R}_{mm'}(\boldsymbol{k})\right]_z - i\sum_{l}\left[\mathbb{R}_{ml}(\boldsymbol{k}) \times \mathbb{R}_{lm'}(\boldsymbol{k})\right]_z \\ &= \left(\frac{\partial \mathbb{R}^{y}_{mm'}(\boldsymbol{k})}{\partial k_x} - \frac{\partial \mathbb{R}^{x}_{mm'}(\boldsymbol{k})}{\partial k_y}\right) - i\sum_{l}\left(\mathbb{R}^{x}_{ml}(\boldsymbol{k})\mathbb{R}^{y}_{lm'}(\boldsymbol{k}) - \mathbb{R}^{y}_{ml}(\boldsymbol{k})\mathbb{R}^{x}_{lm'}(\boldsymbol{k})\right) \\ &\equiv \Omega^{(1)z}_{mm'}(\boldsymbol{k}) + \Omega^{(2)z}_{mm'}(\boldsymbol{k}). \end{aligned} \tag{A1}$$

在此，我们将符号 $\Omega^{(1)z}_{mm'}(\boldsymbol{k})$ 和 $\Omega^{(2)z}_{mm'}(\boldsymbol{k})$ 定义为

$$\begin{aligned}\Omega^{(1)z}_{mm'}(\boldsymbol{k}) &\equiv \left[\nabla_{\boldsymbol{k}} \times \mathbb{R}_{mm'}(\boldsymbol{k})\right]_z = \frac{\partial \mathbb{R}^{y}_{mm'}(\boldsymbol{k})}{\partial k_x} - \frac{\partial \mathbb{R}^{x}_{mm'}(\boldsymbol{k})}{\partial k_y}, \\ \Omega^{(2)z}_{mm'}(\boldsymbol{k}) &\equiv -i\sum_{l}\left[\mathbb{R}_{ml}(\boldsymbol{k}) \times \mathbb{R}_{lm'}(\boldsymbol{k})\right]_z \\ &= -i\sum_{l}\left[\mathbb{R}^{x}_{ml}(\boldsymbol{k})\mathbb{R}^{y}_{lm'}(\boldsymbol{k}) - \mathbb{R}^{y}_{ml}(\boldsymbol{k})\mathbb{R}^{x}_{lm'}(\boldsymbol{k})\right]. \end{aligned} \tag{A2}$$

由于非绝热过程使非阿贝尔贝里曲率具有矩阵形式 $\Omega^{z}_{mm'}(\boldsymbol{k})$，因此无法直接将非阿贝尔结果与阿贝尔结果进行比较。因此，我们重点关注 $\Omega^{(1)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ 和 $\Omega^{(2)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ 的对角元，并探究

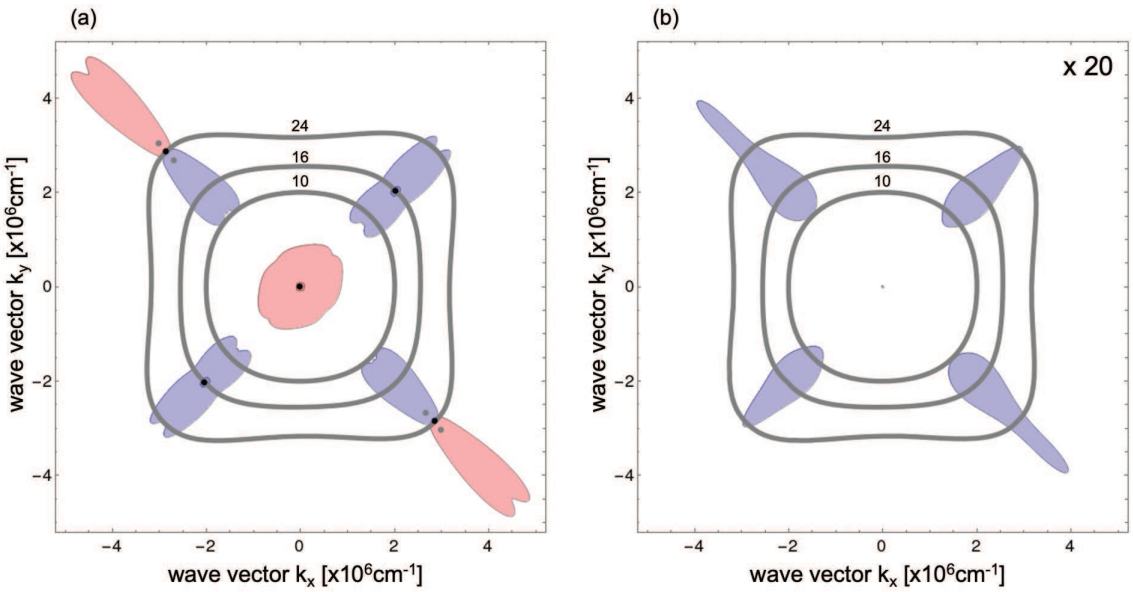

图 9. $\boldsymbol{k}$ HH+ 的非阿贝尔贝里曲率面内对角分量的空间分布；$\Omega^{(1)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ (a) 和 $\Omega^{(2)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ (b)。

通过对角元考察非绝热过程的影响。图 9(a) 和 (b) 分别展示了 $\Omega^{(1)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ 和 $\Omega^{(2)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ 的对角元。将图 9(a) 与图 8(a) 比较可知，对角分量 $\Omega^{(1)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ 与阿贝尔贝里曲率一致。对角元 $\Omega^{(1)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ 可改写为

$$\Omega^{(1)z}_{mm}(\boldsymbol{k}) = \frac{\partial \mathbb{R}^{y}_{mm}(\boldsymbol{k})}{\partial k_x} - \frac{\partial \mathbb{R}^{x}_{mm}(\boldsymbol{k})}{\partial k_y} = \frac{\partial A^{y}_{m}(\boldsymbol{k})}{\partial k_x} - \frac{\partial A^{x}_{m}(\boldsymbol{k})}{\partial k_y} = B^{z}_{m}(\boldsymbol{k}). \tag{A3}$$

这里，符号 $A^{\xi}_{m}(\boldsymbol{k})$ 表示第 m 个空穴的阿贝尔贝里联络，如式 (5) 所定义。因此，对角元 $\Omega^{(1)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ 恰好给出了阿贝尔贝里曲率的面外（z）分量，因此图 9(a) 与图 8(a) 完全重合。

我们还有 $\Omega^{(2)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ 的对角元

$$\Omega^{(2)z}_{mm}(\boldsymbol{k}) = -i \sum_{l} \left[\mathbb{R}^{x}_{ml}(\boldsymbol{k}) \mathbb{R}^{y}_{lm}(\boldsymbol{k}) - \mathbb{R}^{y}_{ml}(\boldsymbol{k}) \mathbb{R}^{x}_{lm}(\boldsymbol{k}) \right] = 2 \sum_{l} \mathrm{Im} \left[\mathbb{R}^{x}_{ml}(\boldsymbol{k}) \mathbb{R}^{y}_{lm}(\boldsymbol{k}) \right]. \tag{A4}$$

这里，l 对 HH 空间 [14]之外的态求和。图 9(b) 表明，所得的对角元 $\Omega^{(2)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ 仅为 $\Omega^{(1)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ 的 1/20。特别是在能量低于 10 meV 的低能区域，我们得到 $\Omega^{(2)z}_{mm}(\boldsymbol{k}) \sim 0$。这就是为什么在这样的低能区域，非阿贝尔贝里相位可以用绝热过程近似。

然而，非绝热过程会导致这些态与外部态发生子带间杂化，尤其是在准简并点 M 和 D 附近，并使贝里曲率的对角分量呈现较小但非零的数值。

$$\Omega^{z}_{mm}(\boldsymbol{k}) = \Omega^{(1)z}_{mm}(\boldsymbol{k}) + \Omega^{(2)z}_{mm}(\boldsymbol{k}) = B^{z}_{m}(\boldsymbol{k}) + \Omega^{(2)z}_{mm}(\boldsymbol{k}). \tag{A5}$$

也就是说，非绝热过程通过 $\Omega^{(2)z}_{mm}(\boldsymbol{k})$ 甚至会影响非阿贝尔贝里曲率的对角分量。

---

[1] G. Dresselhaus，《物理评论》100，580（1955）。[2] E. Rashba，《苏联固体物理》2，1109（1960）。[3] S. D. Ganichev 和 L. E. Golub，《固体物理学现状B辑》251，1801（2014）。[4] T. Tojo 和 K. Takeda，《物理快报A辑》389，127091（2021）。[5] T. Tojo 和 K. Takeda，《固体物理学现状B辑》，第2200319页（2022）。[6] M. V. Berry，《伦敦皇家学会会刊A辑》392，45（1984）。[7] N. A. Sinitsyn、A. H. MacDonald、T. Jungwirth、V. K. Dugaev 和 J. Sinova，《物理评论B》75，045315（2007）。[8] G. Dresselhaus、A. F. Kip 和 C. Kittel，《物理评论》98，368（1955）。[9] F. Wilczek 和 A. Zee，《物理评论快报》52，2111（1984）。[10] J. Pachos、P. Zanardi 和 M. Rasetti，《物理评论A辑》61，010305(R)（1999）。[11] M. M. Wysoki´nski、M. P lodzie´n 和 M. Trif，《物理评论B》104，L041402（2021）。[12] H. Weisbrich、R. Klees、G. Rastelli 和 W. Belzig，《PRX量子》2，010310（2021）。[13] C. Zu、W.-B. Wang、L. He、W.-G. Zhang、C.-Y. Dai、F. Wang 和 L.-M. Duan，《自然》514，72（2014）。[14] M.-C. Chang 和 Q. Niu，《物理学杂志：凝聚态物质》20，193202（2008）。[15] T. Tojo 和 K. Takeda，《日本物理学会志》88，094711（2019）。[16] T. Tojo、K. Tsuruta、Y. Takahashi 和 K. Takeda，《物理学杂志：凝聚态物质》32，095302（2020）。[17] A. Wolos、Z. Wilamowski、C. Skierbiszewski、A. Drabinska、B. Lucznik、I. Grzegory 和 S. Porowski，《物理学B：凝聚态物质》406，2548（2011）。[18] Y. Zhang、F. Xue、C. Tang、J. Li、L. Liao、L. Li、X. Liu、Y. Yang、C. Song 和 X. Kou，美国化学会

纳米 14，17396（2020）。[19] M. Studer、M. P. Walser、S. Baer、H. Rusterholz、S. Sch¨on、D. Schuh、W. Wegscheider、K. Ensslin 和 G. Salis，《物理评论B》82，235320（2010）。[20] M. Reine、R. L. Aggarwal、B. Lax 和 C. M. Wolfe，《物理评论B》2，458（1970）。