二维自旋轨道耦合模型的幺正变换

Manish Kumar Mohanta

印度理工学院布巴内斯瓦尔分校基础科学学院物理系，布巴内斯瓦尔 752050，奥迪沙邦，印度 电子邮箱：manishkmr484@gmail.com，mkmohanta@iitbbs.ac.in

摘要： Rashba、Dresselhaus 和 Weyl 哈密顿量构成了描述凝聚态物质系统中自旋轨道相互作用的基础框架。尽管它们描述不同的材料类别，并产生看似不同的自旋纹理，但通常被视为彼此独立、互不相关的理论框架。本文证明，线性二维 Rashba 模型与 Weyl 模型通过一种特定的幺正变换相联系，该变换可将一个哈密顿量精确映射为另一个哈密顿量。同一个幺正变换也可用于将线性Dresselhaus-1模型映射为Dresselhaus-2模型，反之亦然。这种隐藏的对应关系为自旋轨道相互作用确立了统一的理论基础，深化了我们对自旋轨道耦合的概念理解，并为探索复杂自旋纹理开辟了新途径。为展示其应用，本文提出了一种独特、改进且更为真实的模型哈密顿量 H_{MKM}，将所有已知的基础自旋电子学模型整合在一起。在该模型中，经过MKM变换后，即使不满足 Rashba 与 Dresselhaus 自旋轨道耦合强度相等这一严格条件，也可能观测到持久自旋纹理。

1. 引言：对自旋轨道耦合（SOC）的探索一直是现代凝聚态物理的基石，并促成了拓扑绝缘体、自旋霍尔效应和持久自旋纹理等重要现象的发现。在自旋轨道耦合的各种表现形式中，Rashba 与 Weyl 哈密顿量是两种典型模型，它们形成独特的电子能带结构，并对材料性质产生深远影响。[1–3]尽管这两种模型都描述动量依赖的自旋劈裂，但其基本起源、数学结构以及由此产生的物理现象却显著不同。

Rashba效应源于结构反演不对称性（SIA），通常出现在反演对称性本身遭到破坏的表面或界面处。二维 Rashba 哈密顿量的标准形式为：

$$H_R(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) \quad \text{..... (1)}$$

其中，第一项表示具有有效质量m^* 的标准抛物型动能，第二项为 Rashba 自旋轨道耦合，其特征由耦合强度 α决定。泡利矩阵 σ_x 和 σ_y 确保电子自旋锁定在垂直于其动量的方向上，$k = (k_x, k_y)$。该哈密顿量的本征值描述了两条自旋劈裂的抛物型能带。Rashba 系统在抛物型费米面上呈现螺旋自旋纹理，其劈裂可通过栅极电压调节；但除非加入其他项，否则其拓扑性质平庸。该模型能够准确描述半导体量子阱（InGaAs/InAlAs）、氧化物界面（$LaAlO_3/SrTiO_3$）、拓扑绝缘体（Bi_2Se_3）表面，以及日益增多的二维单层材料和范德华异质结构。[4–10]

相比之下，Weyl 哈密顿量为凝聚态系统中的相对论性准粒子提供了最基本的低能描述之一。三维 Weyl 半金属中存在受拓扑保护的孤立 Weyl 节点，而低维对应体系因其与二维（2D）量子材料和人工构筑异质结构的相关性，日益受到关注。在二维体系中，Weyl 型模型描述由自旋-动量锁定所支配的线性色散能带交叉，可作为刻画手性费米子、非常规自旋纹理和对称性保护的简并的有效框架。Weyl 哈密顿量的最简单形式可写为：

$$H_W(k) = \hbar v_F(\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) \quad \text{..... (2)}$$

其中 v_F 为费米速度。该哈密顿量具有狄拉克型线性色散，但缺乏反演对称性或时间反演对称性。其本征态呈现螺旋自旋纹理，自旋取向锁定在垂直于动量的方向。该模型的关键物理结果是拓扑输运现象的出现，其中最显著的是反常霍尔效应，它源于与外尔点相关联的贝里曲率。[11] 受保护的线性能带交叉——Weyl 节点——出现在单层铋烯/碳化硅 [12]，α- 锑烯 [13]，以及某些笼目晶格 [14–16] 等系统中。

这两种模型的显著特征直接转化为自旋电子学功能。拉什巴相互作用使达塔-达斯自旋场效应晶体管能够实现对自旋进动的电学控制[17,18],，并通过逆自旋伽伐尼效应实现高效的自旋-电荷转换。Weyl 节点及其巨大的贝里曲率，有望在纳米尺度实现无耗散边缘电流和较大的反常霍尔角——这是超低功耗存储与逻辑器件的关键要素。本文聚焦于二维线性模型，阐明了不同自旋轨道耦合模型之间此前未被发现的对应关系。

2. 二维线性哈密顿量的酉算符与变换：

2.1 拉什巴与外尔模型之间的对应关系： 一个酉算符 $U(\phi) = e^{-i\frac{\phi}{2}\sigma_z}$ 可实现自旋空间绕z轴的旋转，并将二维线性 Rashba 哈密顿量映射为 $\phi = \frac{\pi}{2}$ 处的 Weyl 哈密顿量。

证明-1 定理 倒易空间中一阶的二维 Rashba 哈密顿量表示为:

$\mathcal{H}_R(k) = (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)$ …… (3)

在自旋空间中绕z轴旋转 ϕ 角的酉算符为;

$U(\phi) = e^{-i\frac{\phi}{2}\sigma_z}$ …… (4)

在自旋旋转角 ϕ下，泡利矩阵变换为;

$U(\phi)\sigma_x U(\phi)^{\dagger} = cos\phi\ \sigma_x + sin\phi\ \sigma_y$ …… (5)

$U(\phi)\sigma_y U(\phi)^{\dagger} = -sin\phi\ \sigma_x + cos\phi\ \sigma_y$ …… (6)

现在施加 $\phi = \frac{\pi}{2}$ 的旋转，泡利自旋矩阵变换如下：

$U\left(\frac{\pi}{2}\right)\sigma_x U\left(\frac{\pi}{2}\right)^{\dagger} = \sigma_y$ …… (7)

$U\left(\frac{\pi}{2}\right)\sigma_y U\left(\frac{\pi}{2}\right)^{\dagger} = -\sigma_x$ …….. (8)

现在，将酉算符作用于二维 Rashba 哈密顿量，可得新的变换后的哈密顿量：

$\mathcal{H}_T(k) = U(\phi)\mathcal{H}_R(k)U(\phi)^{\dagger}$ …… (9)

对于 $\phi = \frac{\pi}{2}$ 旋转，变换后的哈密顿量 H_T 可改写为：

$$\mathcal{H}_T(k) = U\left(\frac{\pi}{2}\right)\mathcal{H}_R(k)U\left(\frac{\pi}{2}\right)^{\dagger} = (U\sigma_x U^{\dagger})k_y - \left(U\sigma_y U^{\dagger}\right)k_x$$

$$\mathcal{H}_T(k) = \left(\sigma_y k_y + \sigma_x k_x\right) = \mathcal{H}_W$$

右侧正是线性的二维韦尔自旋轨道耦合项。

证明-2 矩阵法：

Rashba 和 Weyl 哈密顿量的矩阵形式如下：

$$\mathcal{H}_R = \begin{pmatrix} 0 & k_y + ik_x \\ k_y - ik_x & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{H}_W = \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix}$$

绕 z-轴进行 $\phi = \frac{\pi}{2}$ 自旋旋转

$$U\left(\frac{\pi}{2}\right) = e^{-i\frac{\pi}{4}\sigma_z} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi/4} & 0 \\ 0 & e^{+i\pi/4} \end{pmatrix}$$

其厄米共轭为

$$U\left(\frac{\pi}{2}\right)^{\dagger} = \begin{pmatrix} e^{+i\pi/4} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}$$

现在来计算 $\mathrm{H}_T(k) = U\mathrm{H}_R U^{\dagger}$

$$U\mathcal{H}_R = \begin{pmatrix} e^{-i\pi/4}.0 & e^{-\frac{i\pi}{4}}(k_y + ik_x) \\ e^{+\frac{i\pi}{4}}.(k_y - ik_x) & e^{+i\pi/4}.0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-\frac{i\pi}{4}}(k_y + ik_x) \\ e^{+\frac{i\pi}{4}}.(k_y - ik_x) & 0 \end{pmatrix}$$

在右侧乘以 $U^\dagger$：

$$\mathcal{H}_T(k) = (U\mathcal{H}_R)U^\dagger = \begin{pmatrix} 0.e^{+i\pi/4} & e^{\frac{-i\pi}{4}}(k_y + ik_x).e^{-i\pi/4} \\ e^{+\frac{i\pi}{4}}.(k_y - ik_x).e^{+i\pi/4} & 0.e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}$$

合并相位因子：$e^{-i\pi/4}$、$e^{-i\pi/4} = e^{-i\pi/2} = -i$ 和$e^{+i\pi/4}$。$e^{+i\pi/4} = e^{+i\pi/2} = +i$。

$$\mathcal{H}_T(k) = \begin{pmatrix} 0 & -i(k_y + ik_x) \\ +i(k_y - ik_x) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} = (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) = \mathcal{H}_W$$

本研究通过两种互补的推导表明，二维 Rashba 和 Weyl 自旋轨道耦合项可通过绕z轴旋转 $\frac{\pi}{2}$ 联系起来。图1展示了哈密顿量 $\mathrm{H}_T(k) = U(\phi)\mathrm{H}_R(k)U(\phi)^\dagger$ 在不同旋转角 ϕ 下得到的自旋纹理。图1还支持上述推导：当旋转角为 $\phi = \frac{\pi}{2}$ 时，Rashba 自旋纹理会转变为 Weyl 自旋纹理。而在其他任意角度下，$\mathrm{H}_T(k)$ 都会产生螺旋自旋纹理。

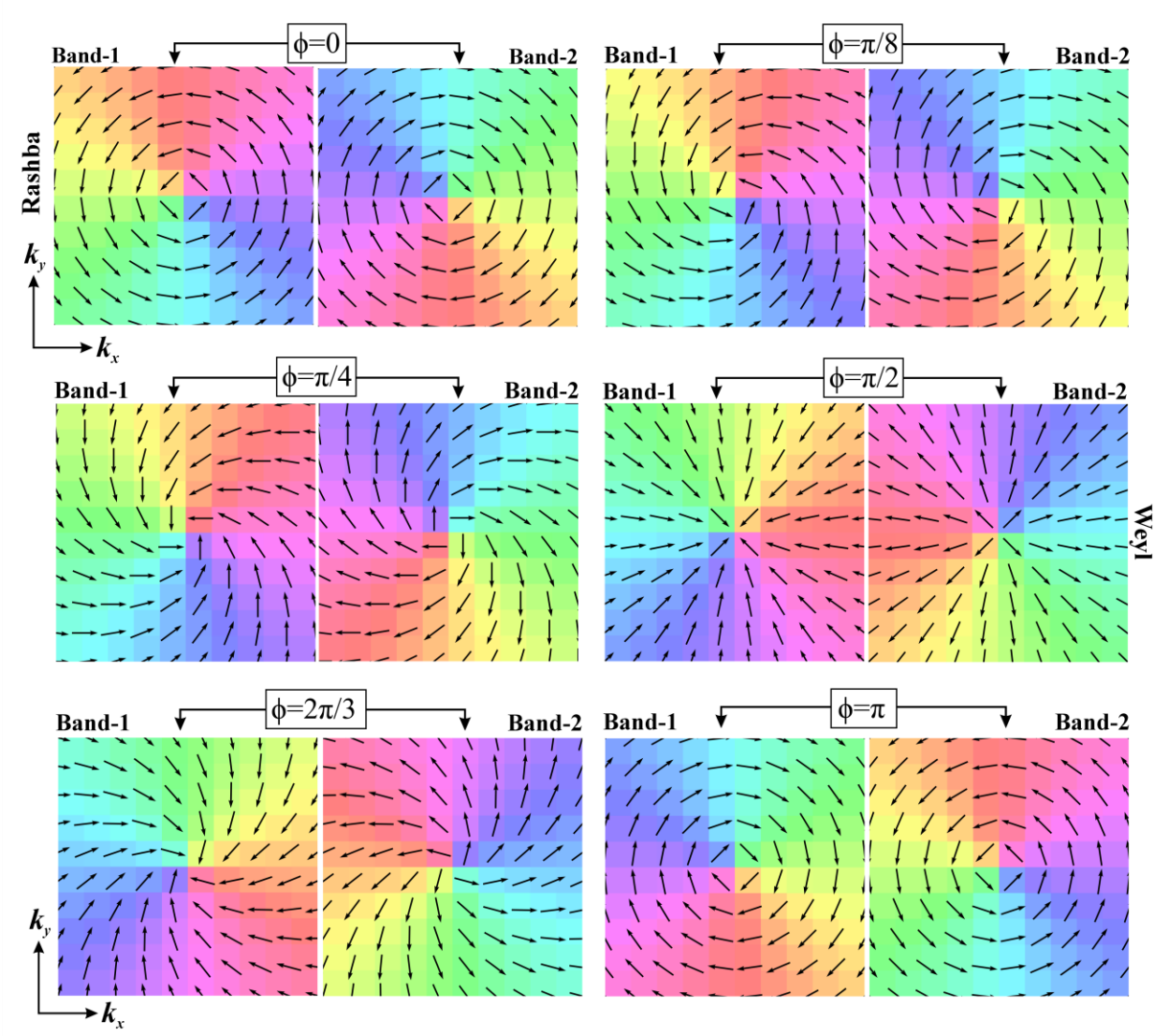

图1：对于不同的旋转角 ϕ，由变换后的哈密顿量 $H_T(k)$ 得到的自旋纹理。绘图所采用的 $[k_x, k_y]$ 动量范围为 [-1,1]。

值得注意的是，正如 Mohanta 和 Jena 在参考文献 [19] 中所报告的，先前在 Rashba 项与 Weyl 项结合时也观察到了类似的螺旋自旋纹理。

$$\mathcal{H}_{MJ2} = \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \mathcal{J}(\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) \quad \ldots\ldots\ldots (10)$$

作为比较，H_{MJ2} 的自旋纹理如图2所示。现在，对比图1和图2可以得出结论：从$H_T(k)$获得的自旋纹理同样可以从H_{MJ2} 中精确获得，这使得这两个哈密顿量等价。

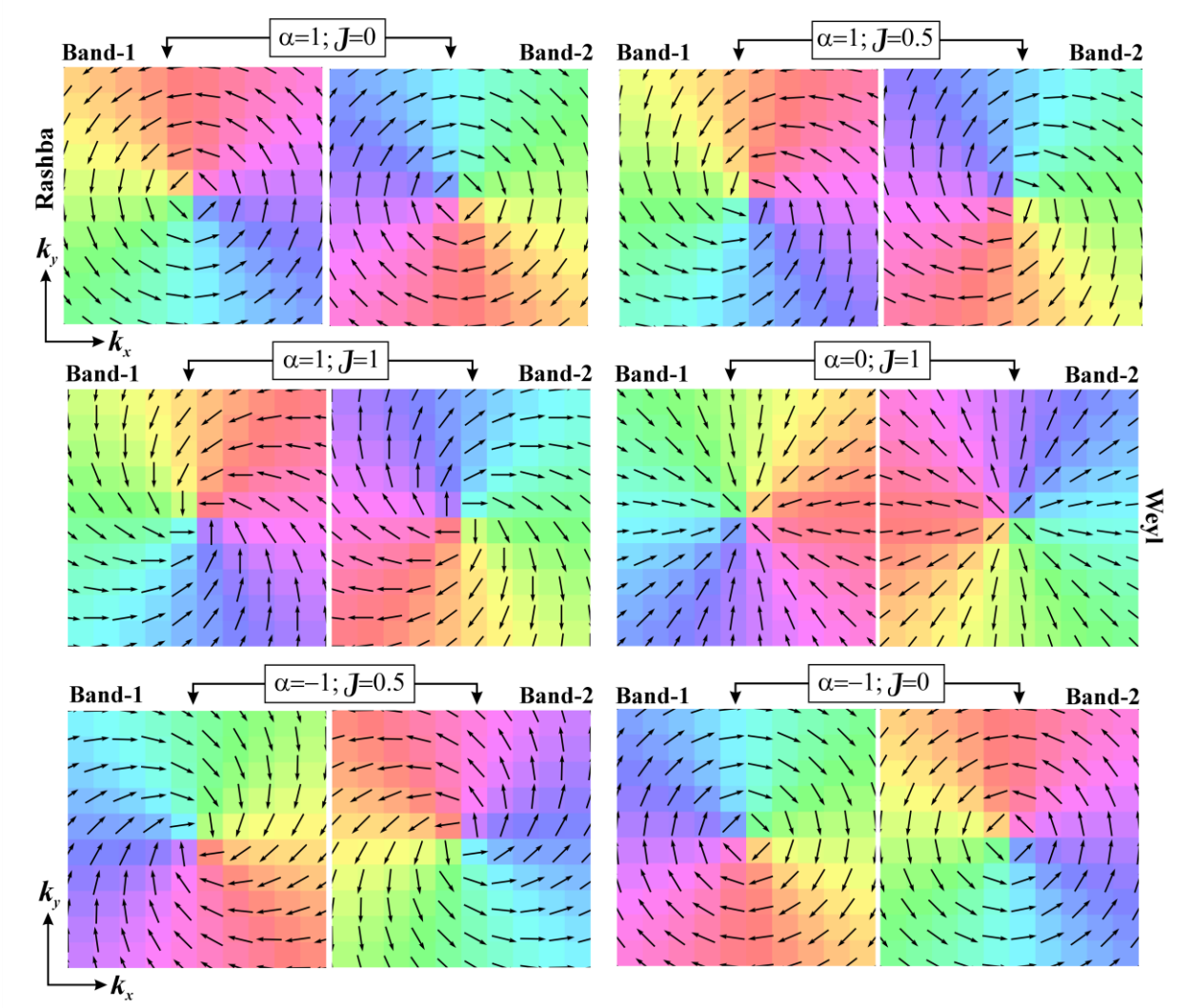

图 2：哈密顿量 H_{MJ2} 在不同自旋轨道耦合常数下得到的自旋纹理。绘图所用的动量范围 $[k_x, k_y]$ 选为 [-1,1]。

2.2 Dresselhaus-1 与 Dresselhaus-2 模型之间的对应关系：使用相同的酉算符（$U(\phi) = e^{-i\frac{\phi}{2}\sigma_z}$）并在相同的旋转角$\phi = \frac{\pi}{2}$下，可以将 Dresselhaus-1 转换为 Dresselhaus-2 自旋轨道耦合项。

$$H_{Dresselhaus-1} = (\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) \quad \text{..... (11)}$$
$$H_{Dresselhaus-2} = (\sigma_x k_y + \sigma_y k_x) \quad \text{..... (12)}$$

将一种自旋电子学模型映射到另一种模型的特定幺正变换称为 MKM变换。

3. 应用：持久自旋纹理（PST）案例研究：

过去二十年来，理论研究预测，在极为严格的条件下会出现持久自旋纹理（PST），其中最显著的是 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合强度满足 $\alpha = \pm\beta$ 关系。这一开创性概念由 Schliemann 等人提出 [20]，此后一直作为描述 PST 的主要理论框架。最近，Mohanta 和 Jena [19] 提出了一种相关的解析模型，其中当 $\alpha = \pm$M 时也可能出现 PST。总体而言，这些研究表明，PST 的实现仅限于严格界定的参数区域，凸显了传统上认为其出现所必需的严苛条件。这些条件是通过考察以下模型哈密顿量得到的：

$$\mathcal{H}_S = \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \beta(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) \quad \text{..... (13)}$$

$$\mathcal{H}_{MJ1} = \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \mathcal{M}(\sigma_x k_y + \sigma_y k_x) \quad \text{..... (14)}$$

在这种极端条件下，自旋取向变得与动量无关，从而使自旋寿命无限长，这非常适合用于设计非弹道自旋场效应晶体管。

使用上一节定义的幺正变换算符，可以引入另一种形式，如下所示；

$$\mathcal{H}_{MKM} = \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \beta(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) + \gamma_1[U(\phi)(\sigma_x k_x + \sigma_y k_y)U(\phi)^\dagger] + \gamma_2[U(\phi)(\sigma_x k_y + \sigma_y k_x)U(\phi)^\dagger] \quad \text{..... (15)}$$

其中，α和 β 分别表示 Rashba 和 Dresselhaus-1 相互作用的自旋轨道耦合强度，而γ_1和 γ_2 则分别表示 Weyl 和 Dresselhaus-2 自旋轨道耦合相互作用的强度。方程（15）给出了一个统一表达式，涵盖了所有主要自旋电子学模型的线性贡献。第三项将 Weyl 形式映射为 Rashba 形式（第一项），而第四项则在$\phi = \frac{\pi}{2}$ 处将 Dresselhaus-2 形式转换为 Dresselhaus-1 形式（第二项）。

在 $\phi = \frac{\pi}{2}$ 条件下，H_{MKM} 可改写为：

$$\mathcal{H}_{MKM} = (\alpha - \gamma_1)(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + (\beta - \gamma_2)(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) \quad \text{..... (16)}$$

现在，要实现持久自旋纹理（PST），由方程（16）得到的必要条件是（$\alpha-\gamma_1$）$=\pm$（$\beta-\gamma_2$）。满足这一关系的代表性参数组有 $[\alpha,\gamma_1;\ \beta,\gamma_2]$，例如 [1,0.5；0.8,0.3]，[1.0,0.5；0.6,0.1] 等。值得注意的是，这些示例表明，正如先前报道的那样，观测到 PST 并不需要满足严格的 $\alpha=\pm\beta$ 条件，还取决于其他因素。因此，哈密顿量 H_{MKM} 比传统模型更加灵活，放宽了对自旋轨道耦合强度原本严格的限制。这进一步表明，PST 可以源自更广泛的物理机制，而不仅限于自旋轨道耦合关系通常施加的约束。图3展示了不同自旋轨道耦合强度下，由 H_{MKM} 得到的自旋纹理。值得注意的是，根据各个哈密顿量以及哈密顿量 H_T（k）的幺正变换的定义方式，这些条件可能会有所不同（更多详情见补充材料）。PST 的数学模型列于表1。

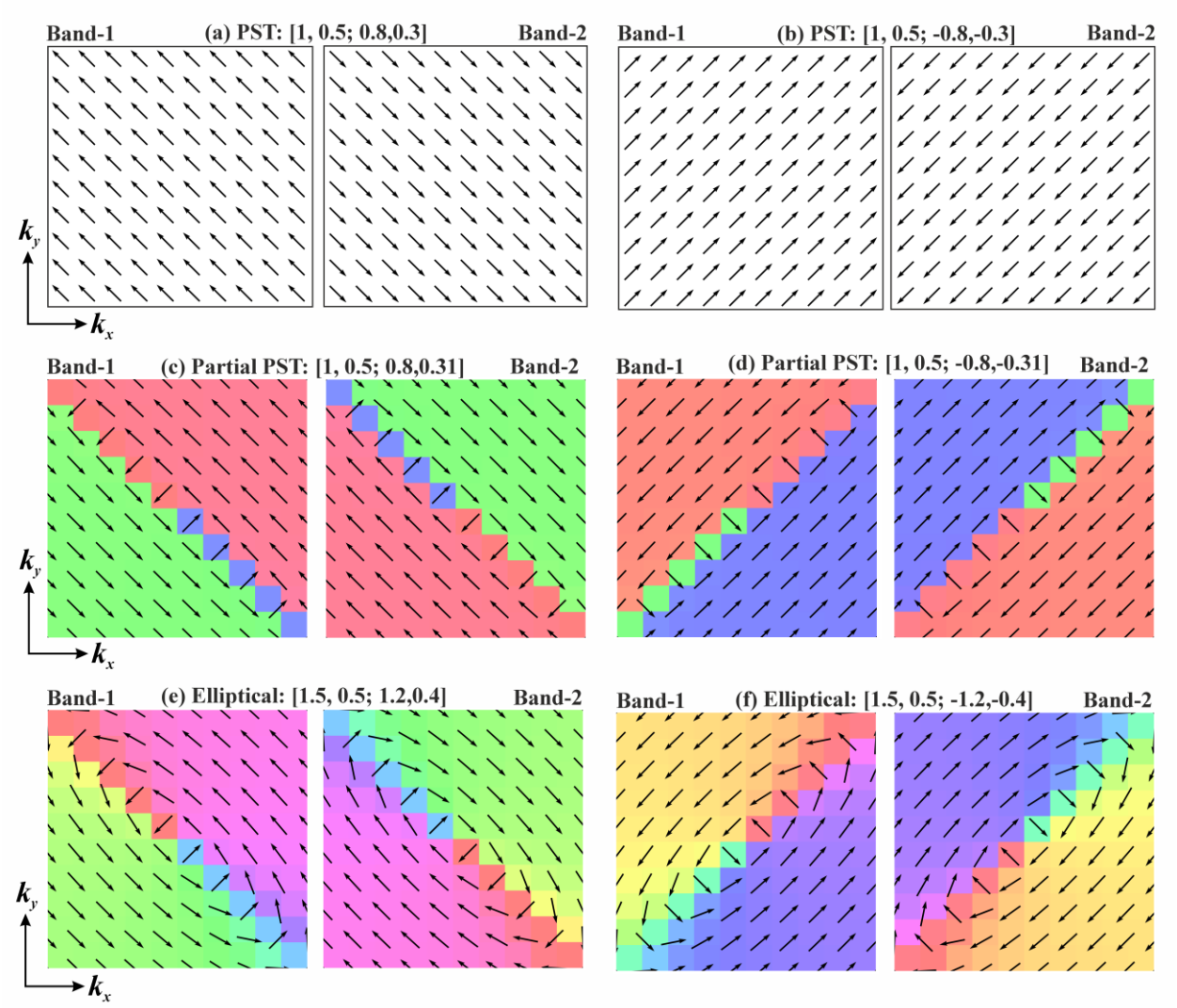

图 3：由哈密顿量 H_{MKM} 得到的自旋纹理，展示了其重现早期研究所报告自旋纹理的能力：(a-b) 在条件 $|\alpha-\gamma_1| \nparallel |\beta-\gamma_2|$ 下的持久自旋纹理（PST），(c-d) 当 $|\beta-\gamma_2| \to |\alpha-\gamma_1|$ 时的部分 PST，(d) 当 $|\beta-\gamma_2| \lll |\alpha-\gamma_1|$ 时的椭圆形自旋图样。参考文献 [19,20] 中以图示方式展示了类似条件。绘图时，选取的动量范围为 $[k_x, k_y]$ [-1,1]。

表1：持久自旋纹理的表现形式的数学表述

自旋轨道耦合相互作用	持久自旋纹理的条件	参考文献
$C*[\sigma_x k_y, \sigma_x k_x, \sigma_y k_x, \sigma_y k_y, \sigma_z k_x, \sigma_z k_y]$	对于任意自旋轨道耦合强度 C	[19]
$\alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \beta(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y)$	$\alpha = \pm\beta$	[20]
$\alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \mathrm{M}(\sigma_x k_y + \sigma_y k_x)$	$\alpha = \pm\mathrm{M}$	[19]
$\alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \beta(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) + \gamma_1[U(\frac{\pi}{2})(\sigma_x k_x + \sigma_y k_y)U(\frac{\pi}{2})^{\dagger}]$	$(\alpha - \gamma_1) = \pm\beta$	本研究 (更多内容请见 条件 补充材料)
$\alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \beta(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) + \gamma_2[U(\frac{\pi}{2})(\sigma_x k_y + \sigma_y k_x)U(\frac{\pi}{2})^{\dagger}]$	$\alpha = \pm(\beta - \gamma_2)$	
$\alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \beta(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) + \gamma_1[U(\frac{\pi}{2})(\sigma_x k_x + \sigma_y k_y)U(\frac{\pi}{2})^{\dagger}] + \gamma_2[U(\frac{\pi}{2})(\sigma_x k_y + \sigma_y k_x)U(\frac{\pi}{2})^{\dagger}]$	$(\alpha - \gamma_1) = \pm(\beta - \gamma_2)$	

酉算符：$U(\phi) = e^{-i\frac{\phi}{2}\sigma_z}$

α：Rashba 自旋轨道耦合强度

β：Dresselhaus-1 自旋轨道耦合强度

γ_1：Weyl 自旋轨道耦合强度

M *or* γ_2：Dresselhaus-2 自旋轨道耦合强度

结论：总之，尽管 Rashba 和 Weyl 哈密顿量通常被视为分别适用于不同材料、具有截然不同自旋纹理的模型，本研究仍确立了二者之间的量子对应。解析推导和图形分析表明，自旋空间中的幺正旋转能够连接这两种模型。此外，同一幺正变换也可用于将 Dresselhaus-1 映射为 Dresselhaus-2 模型。本研究揭示了不同自旋轨道耦合模型背后固有的旋转对称性。借助所定义的幺正变换，本研究提出了一种独特的解析模型 H_{MKM}，由以下各基础自旋电子学模型的线性项组成：

在解析推导和图形解释的支持下，与现有模型不同，所提出的理论表明，实现持久自旋纹理（PST）并不需要满足 Rashba (α) 与 Dresselhaus (β/M) 自旋轨道耦合强度相等这一传统要求。

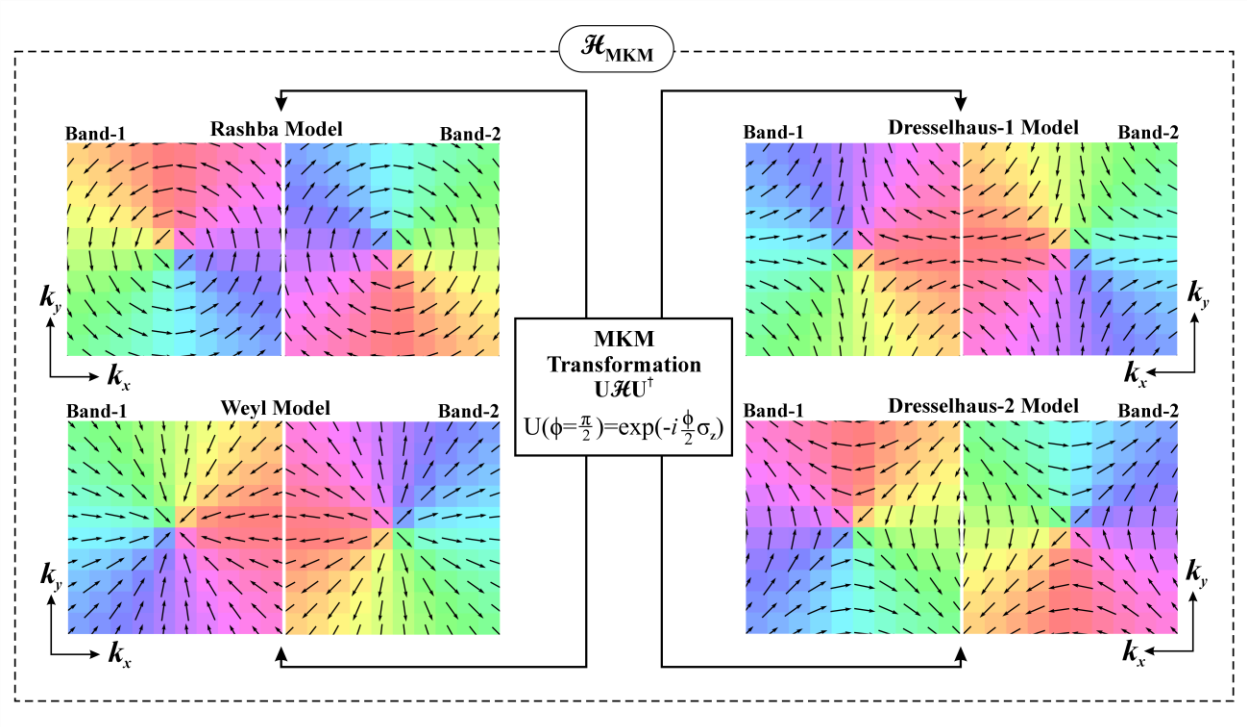

图4： 结论示意图。

致谢： M. K. Mohanta 感谢 Anusandhan国家研究基金会（ANRF）通过拉马努金教职奖学金提供的资助（资助编号：RJF/2025/000601）。作者衷心感谢布巴内斯瓦尔印度理工学院提供的研究基础设施和设施。

数据可用性声明： 支持本研究的所有数据均可在论文中找到。

参考文献：

[1] Y. A. Bychkov 和 É. I. Rashba, 《谱简并解除的二维电子气性质》, JETP Lett **39**, 78 (1984). [2] H. Weyl, 《电子与引力》I, Z. Für Phys. **56**, 330 (1929). [3] J. A. Krieger 等, 《手性拓扑半金属中的 Weyl自旋-动量锁定》, Nat. Commun. **15**, 3720 (2024). [4] J. Nitta、T. Akazaki、H. Takayanagi 和 T. Enoki, 《反转型 I$\mathrmn 0.53$G$\mathrma 0.47$As/I$\mathrmn 0.52$A$\mathrml 0.48$As 异质结构中自旋轨道相互作用的栅极调控》, Phys Rev Lett **78**, 1335 (1997). [5] A. Manchon、H. C. Koo、J. Nitta、S. M. Frolov 和 R. A. Duine, 《Rashba自旋轨道耦合的新视角》, Nat. Mater. **14**, 871 (2015). [6] M. K. Mohanta、A. Arora 和 A. De Sarkar, 《面向下一代自旋电子器件的柔性镁单硫属化物单层中可调Rashba效应与压电性的融合》, Nanoscale **13**, 8210 (2021). [7] A. D. Caviglia、M. Gabay、S. Gariglio、N. Reyren、C. Cancellieri 和 J.-M. Triscone, 《氧化物界面处可调的Rashba自旋轨道相互作用》, Phys. Rev. Lett. **104**, 126803 (2010). [8] W. Lin 等, 《利用3d电子调控非对称氧化物异质结构中的Rashba自旋轨道相互作用》, Nat. Commun. **10**, 3052 (2019). [9] T.-H. Wang 和 H.-T. Jeng, 《Bi2Se3/MoTe2异质结构中具有大自旋劈裂的宽范围理想二维Rashba电子气》, Npj Comput. Mater. **3**, 5 (2017). [10] Z.-H. Zhu 等, 《拓扑绝缘体${\mathrm{Bi}}_{2}{\mathrm{Se}}_{3}$表面的Rashba自旋劈裂调控》, Phys. Rev. Lett. **107**, 186405 (2011). [11] Y. Zhang、Y. Sun 和 B. Yan, 《Weyl半金属材料中的贝里曲率偶极：第一性原理研究》, 物理评论B **97**, 041101 (2018). [12] F. Reis、G. Li、L. Dudy、M. Bauernfeind、S. Glass、W. Hanke、R. Thomale、J. Schäfer 和 R. Claessen, 《碳化硅衬底上的铋烯：一种高温量子自旋霍尔材料候选》, Science **357**, 287 (2017). [13] Q. Lu、K. Y. Chen、M. Snyder、J. Cook、D. T. Nguyen、P. V. S. Reddy、T.-R. Chang、S. A. Yang 和 G. Bian, 《在非对称非共形\ensuremath\alpha-锑烯中观测到对称性保护的狄拉克态》, Phys Rev B **104**, L201105 (2021). [14] Q. Zhang、Y. Zhang、M. Matsuda、V. O. Garlea、J. Yan、M. A. McGuire、D. A. Tennant 和 S. Okamoto, 《笼目晶格磁性Weyl半金属中的隐局域对称性破缺》, J. Am. Chem. Soc. **144**, 14339 (2022). [15] B. He、M. Yao、Y. Pan、K. E. Arpino、D. Chen、F. M. Serrano-Sanchez、S. Ju、M. Shi、Y. Sun 和 C. Felser, 《氯掺杂增强Co3Sn2S2笼目铁磁体中的Weyl半金属特征》, Commun. Mater. **5**, 275 (2024). [16] I. Belopolski 等, 《关联笼目磁体中Weyl费米子湮灭的特征》, Phys Rev Lett **127**, 256403 (2021). [17] S. Datta, 《我们如何提出自旋晶体管》, Nat. Electron. **1**, 604 (2018). [18] S. Datta 和 B. Das, 《电光调制器的电子模拟器》, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).

[19] M. K. Mohanta 和 P. Jena，《量子材料中的反常自旋纹理表征：密度泛函理论和解析模型的见解》，物理评论B **111**，045140（2025年）。[20] J. Schliemann、J. C. Egues 和 D. Loss，《非弹道自旋场效应晶体管》，Phys Rev Lett **90**，146801（2003年）。