

金属表面 Rashba 自旋轨道耦合作用研究进展

龚士静 段纯刚

Recent progress in Rashba spin orbit coupling on metal surface

Gong Shi-Jing Duan Chun-Gang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 187103 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.187103

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.187103>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I18>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Heusler 合金 $\text{Co}_2\text{MnAl}(100)$ 表面电子结构、磁性和自旋极化的第一性原理研究

First-principles study of the electronic structure magnetism and spin-polarization in Heusler alloy $\text{Co}_2\text{MnAl}(100)$ surface

物理学报.2015, 64(14): 147301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.147301>

不同 N 掺杂构型石墨烯的量子电容研究

Quantum capacitance performance of different nitrogen doping configurations of graphene

物理学报.2015, 64(12): 127301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.127301>

单轴压力下 $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ (X=Sb Bi) 薄膜拓扑相变的第一性原理研究

First-principles study on the uniaxial pressure induced topological quantum phase transitions of $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ (X =Sb Bi) thin films

物理学报.2015, 64(10): 107301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.107301>

磁场中的拓扑绝缘体边缘态性质

Edge mode of InAs/GaSb quantum spin hall insulator in magnetic field

物理学报.2015, 64(9): 097302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.097302>

HF^+ 离子在旋轨耦合作用下电子态的特性

The characteristics of excited states for HF^+ ion under spin-orbit coupling

物理学报.2014, 63(12): 127102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.127102>

专题: 计算物理的近期发展和应用

金属表面 Rashba 自旋轨道耦合作用研究进展*

龚士静 段纯刚†

(华东师范大学, 信息科学技术学院极化材料与器件教育部重点实验室, 上海 200241)

(2015年5月19日收到; 2015年7月6日收到修改稿)

自旋轨道耦合是电子自旋与轨道相互作用的桥梁, 它提供了利用外电场来调控电子的轨道运动、进而调控电子自旋状态的可能. 固体材料中有很多有趣的物理现象, 例如磁晶各向异性、自旋霍尔效应、拓扑绝缘体等, 都与自旋轨道耦合密切相关. 在表面/界面体系中, 由于结构反演不对称导致的自旋轨道耦合称为 Rashba 自旋轨道耦合, 它最早在半导体材料中获得研究, 并因其强度可由栅电压灵活调控而备受关注, 成为电控磁性的重要物理基础之一. 继半导体材料后, 金属表面成为具有 Rashba 自旋轨道耦合作用的又一主流体系. 本文以 Au(111), Bi(111), Gd(0001) 等为例综述了磁性与非磁性金属表面 Rashba 自旋轨道耦合的研究进展, 讨论了表面电势梯度、原子序数、表面态波函数的对称性, 以及表面态中轨道杂化等因素对金属表面 Rashba 自旋轨道耦合强度的影响. 在磁性金属表面, 同时存在 Rashba 自旋轨道耦合作用与磁交换作用, 通过 Rashba 自旋轨道耦合可能实现电场对磁性的调控. 最后, 阐述了外加电场和表面吸附等方法对金属表面 Rashba 自旋轨道耦合的调控. 基于密度泛函理论的第一性原理计算和角分辨光电子能谱测量是金属表面 Rashba 自旋轨道耦合的两大主要研究方法, 本文综述了这两方面的研究结果, 对金属表面 Rashba 自旋轨道耦合进行了深入全面的总结和分析.

关键词: Rashba, 自旋轨道耦合, 金属表面, 角分辨率光电子能谱

PACS: 71.70.Ej, 73.20.At, 79.60.Bm, 72.25.-b

DOI: 10.7498/aps.64.187103

1 引言

电子同时具有电荷和自旋自由度, 但传统的半导体电子器件主要是基于电子的电荷, 而较少关注其自旋自由度. 随着器件尺寸越来越小, 量子效应日渐突出, 器件能耗问题也越来越严重. 人们在低维纳米尺度的体系中发现, 自旋在很多性能方面比电荷更优越, 例如, 退相干时间长、能耗低等, 这就使得人们试图利用电子的自旋自由度来作为信息载体, 设计新一代的电子器件. 一门新兴的凝聚态物理子学科——自旋电子学^[1], 逐渐形成并迅速发展起来.

如何有效控制和操作电子的自旋态是自旋电子学的一项重要研究. 自旋轨道耦合将电子的轨

道运动和电子的自旋联系在一起, 为人们提供了一种有可能利用外电场来调控电子的轨道运动、进而调控电子自旋的手段. 这样一种全电学、不需要外磁场或磁性材料就能调控自旋的方法, 引起了人们的广泛兴趣和研究热情. 图 1 是基于自旋轨道耦合作用调控的 Datta-Das 自旋场效应晶体管模型^[2], 它至今仍代表着人们对自旋轨道耦合作用的最高期望. 随着理论与实验研究的不断深入, 越来越多与自旋轨道耦合作用相关的新奇物理现象被发现, 例如, 自旋过滤效应^[3-5]、自旋霍尔效应^[6-8]与逆自旋霍尔效应^[9,10]、拓扑绝缘体等^[11-14], 这更进一步推动了自旋-轨道耦合效应以及自旋电子学的研究.

在各种自旋轨道耦合作用形式中, 源于表

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2014CB921104, 2013CB922301)、国家自然科学基金 (批准号: 61125403)、上海市自然科学基金 (批准号: 14ZR1412700) 和上海市优秀学术带头人计划资助的课题.

† 通信作者. E-mail: cgduan@clpm.ecnu.edu.cn

面/界面结构反演不对称的Rashba自旋轨道耦合作用因为其强度可由栅极电压灵活调控而备受关注^[15-17]. Rashba自旋轨道耦合的研究最早始于半导体异质结, 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. 继半导体材料后, 人们在金属表面也观察到了Rashba自旋轨道耦合引起的自旋劈裂^[18-22], 同时基于表面/界面的自旋轨道效应也已成为电控磁性的重要内容^[23]. 经过十多年的研究, 人们对金属表面Rashba自旋轨道耦合效应已有较深刻的认识. 本文分别针对磁性和非磁性金属表面讨论Rashba自旋轨道耦合的物理机理以及相应调控方法.

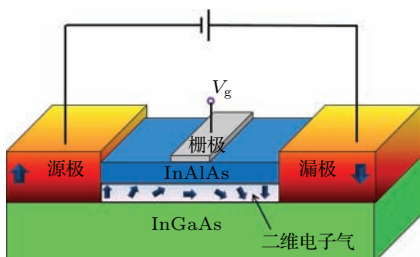


图1 Datta-Das自旋场效应晶体管模型示意图^[2]

Fig. 1. Datta-Das proposal of a spin field-effect transistor^[2].

自旋轨道耦合是一种相对论效应, 在固体中高速运动的电子的能量会因自旋轨道耦合作用有所修正, 并因此带来新的物理现象^[24]. 考虑自旋轨道耦合后单电子近似的哈密顿量写为

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0(r) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \sigma \cdot \nabla V_0(r) \times p,$$

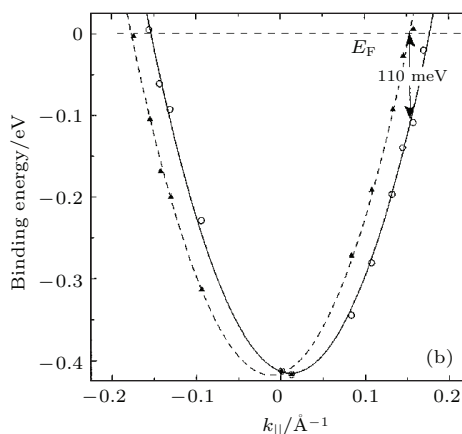
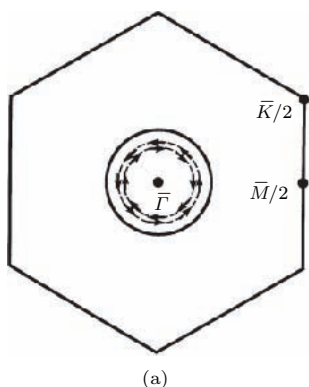


图2 (a) Au(111)表面布里渊区与费米面, 箭头与虚线用来表示费米面上电子自旋取向; (b) 表面态能量色散关系, 实心三角和空心圆为实验数据, 虚线和实线为拟合的抛物线^[25]

Fig. 2. (a) A view of the Fermi surfaces and (one half of) the surface Brillouin zone for Au(111), the arrows and dashed lines indicate the spin orientations for the proposed surface Fermi surface, and the solid line represents the bulk Fermi surface neck; (b) $E-k$ dispersion of the surface states, experimental data are open circles and filled triangles, the solid and dashed lines are parabolic fits^[25].

等式右边最后一项为自旋轨道耦合项, 它描述的是动量为 p , 自旋为 σ 的电子在电场 $V_0(r)/e$ 中做轨道运动时所感受到的有效磁场的作用, $V_0(r)$ 包含了由离子实(即原子核和内层电子)提供的周期性势场、晶格缺陷和声子导致的势场, 以及外加的势场. 通常具有较高原子序数的离子, 其周围的电子具有更高的运动速度, 因此通常具有更强的自旋轨道耦合作用. 自旋轨道耦合也可以描述为 $L \cdot S$, 其中 L 与 S 分别为轨道角动量与自旋角动量, 这意味着二度简并的电子能级在考虑了自旋轨道耦合作用后将分裂为与轨道平行与反平行的两个分立能级.

2 非磁性金属表面Rashba自旋轨道耦合

金属表面根据磁性可分为磁性金属表面和非磁性金属表面. 在Rashba自旋轨道耦合研究方面, 被研究的非磁性金属表面有原子序数较大的Au(111)等^[25], Au(110)^[26], Ag(111)^[27], Pt(111)^[19], Bi(111)^[28], Mo(110)^[29], W(110)^[29], Lu(0001)等^[29], 磁性金属表面有Gd(0001)^[20], Tb(0001)^[21], 以及graphene/Ni(111)等^[30]. 针对非磁性金属表面, 主要阐述了表面态波函数的对称性、表面电势梯度以及表面态轨道成分对Rashba自旋轨道耦合的影响; 在磁性金属表面主要阐述了Rashba自旋轨道耦合作用与磁交换作用共同作用下的表面能带, 以及Rashba自旋轨道耦合对磁性的影响.

非磁性金属表面Rashba自旋轨道耦合作用的研究最早始于Au(111)表面. Au属于面心立方, [111]方向上原子按照ABCABC...的顺序排列, 其布里渊区如图2(a)所示. 1996年Lashell等^[25]利用光电子能谱仪对Au(111)表面的能带结构进行了测量, 图2(b)中, 空心圆和实心三角是实验数据, 抛物线为拟合曲线. 从图中可以看到, 在费米波矢 0.153 \AA^{-1} 处, Rashba自旋轨道耦合劈裂能可达110 meV. 利用Rashba自旋轨道耦合的近自由电子模型估算得到的自旋劈裂能量大约只有 10^{-6} eV , 与实验以及第一性原理计算结果有较大差别, 这是因为实际晶体中自旋轨道耦合作用受离子实影响,

核外电子并不是真正的自由电子. 2001年Nicolay等^[27]结合第一性原理计算与高精度光谱测量对Au(111)和Ag(111)表面做了类似的研究, 获得了与LaShell等^[25]一致的结果, 但是在与Au同一族的Ag(111)表面态中, 没有观察到明显的Rashba自旋劈裂.

2008年Mazzarello等^[31]对Au(111)表面态进行了全面分析, 图3是他们考虑了相对论效应利用密度泛函理论计算的24层Au(111)能带, 其中 L 为费米能级附近的浅能级表面态, 主要由s和p轨道贡献, S_2 为深能级表面态, 主要由s和 d_{z^2} 轨道贡献.

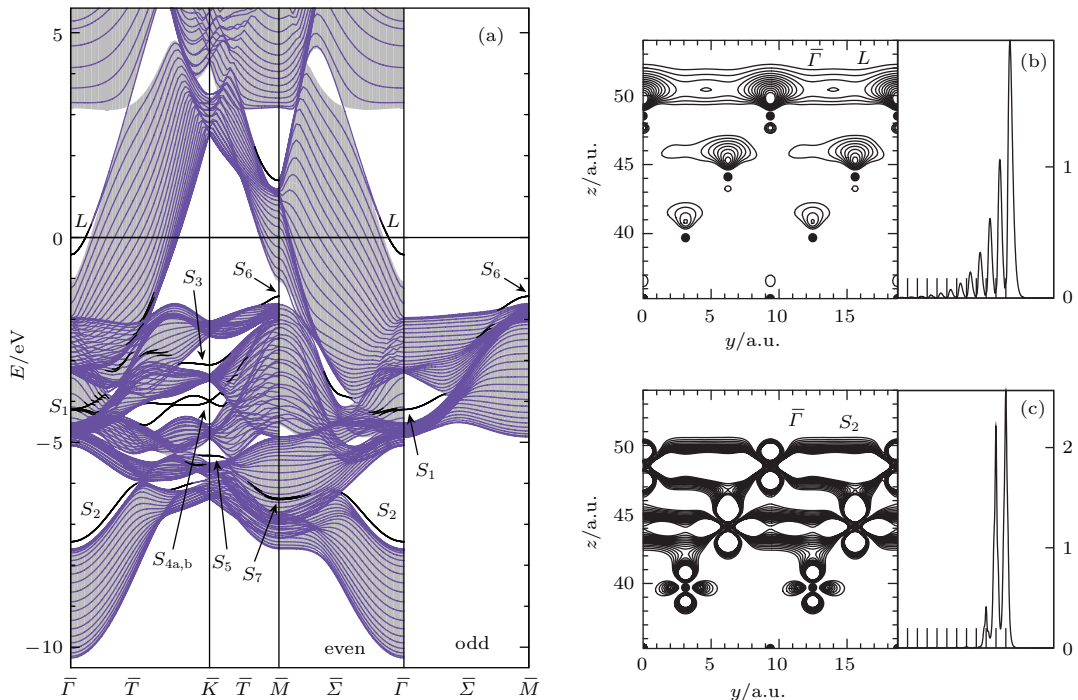


图3 (a) 24层Au(111)的电子结构, 黑线表示表层原子与次表层原子贡献的表面态或共振态, (b)和(c)分别为 Γ 点处 L 和 S_2 表面态电荷密度分布^[31]

Fig. 3. (a) Band structure of the 24-layer Au(111) slab along the high symmetry lines, surface or resonant states was indicated with thick continuous lines, contour plots and planar averages of the electronic charge density of the (b) L -states and (c) S_2 -states at Γ ^[31].

2006年, Bihlmayer等^[18]研究了Au(111), Ag(111), 和Lu(0001)薄膜表面的Rashba自旋轨道耦合. 以23层Au(111)为例, 他们发现Au的表面态明显扩展到体内, 表面态中的自旋劈裂超过40%来自次表层原子(见图4). 事实上由于屏蔽效应的影响, 表面电势梯度在次表层原子(S-1层)处已经很弱, 这就意味着表面态波函数的不对称对Au(111)表面Rashba自旋轨道耦合有很大影响. 研究指出, 晶体中原子近核部分波函数用球谐函数

展开可以描述的很好, 但是对于某个 l 轨道占主导的表面态而言, 波函数梯度依赖电子态在不同轨道上的比值 $l/l \pm 1$, 这也意味着单纯某一个 l 轨道, 无论是p还是d轨道, 都不能产生Rashba自旋轨道耦合, 只有p轨道与d轨道相互杂化才可能形成波函数的衰减并最终导致Rashba自旋劈裂. Au(111)与Ag(111)的表面态主要由p轨道贡献. 在对比研究Au(111)与Ag(111)表面时, 他们发现在Ag(111)表面 $p:d = 9.5$, Au(111)表面 $p:d = 3.3$. Lu的原

子序数为71, 但Lu(0001)表面并没有明显Rashba自旋劈裂. 从表面态成分分析得知, Lu(0001)表面态中d轨道是主要成分, $d : p = 2.7$, 表面态从表层原子到体内衰减很快, 计算表面态只需要考虑10个原子层厚的薄膜. Lu(0001)表面态向体内快速衰减的性质与图4中Gd(0001)表面态相似. Bihlmayer等^[18]第一次提出了利用轨道成分比量化波函数的不对称性, 但他们并没有给出轨道成分比与Rashba自旋轨道耦合强度的明确关系. 此外他们还发现, Rashba自旋劈裂主要来自近核区的贡献, 这是因为近核区的电势梯度最大. 图4的插图给出了Au(111)表层原子中Rashba自旋劈裂对原子半径的依赖, 我们可以看到90%的自旋劈裂来自原子半径小于0.25 a.u.的近核区域.

2009年Nagano等^[26]对比研究了Au(111)与Au(110)表面态, 研究发现Au(111)表面态主要来自最表层原子的贡献, 表面态从表层原子向体内呈指数衰减, 但Au(110)表面态最表层原子和次表层原子贡献基本相同. 对Au(110)表面, 他们考虑了 (1×1) 和 (2×1) 行丢失重构表面两种情况. 图5(a)是Au(110) (1×1) 表面布里渊区 \bar{Y} 点附近电子结构, 从中可以看到沿着 $\bar{\Gamma}\bar{Y}$ 路径的Rashba自旋轨道耦合劈裂比 $\bar{Y}\bar{S}$ 路径的要大很多. 图5(b)是Au(110) (2×1) 表面布里渊区 $\bar{\Gamma}$ 点附近电子结构, 表面态分布在费米能级以上, 并且Rashba自旋轨道耦合劈裂沿 $\bar{\Gamma}\bar{Y}$ 与 $\bar{\Gamma}\bar{X}$ 表现出非常明显的各向

异性, 这种各向异性与表面态的对称性有关. 为了更好地理解Au(111), Au(110) (1×1) 与 (2×1) 表面态Rashba自旋轨道耦合的不同, Nagano等计算了这三种表面的态密度分布, 图6(a)—(c)分别给出了Au(111)表面态 $\bar{\Gamma}$ 点波函数平方 $|\psi_{SS}^{k//}|^2$,

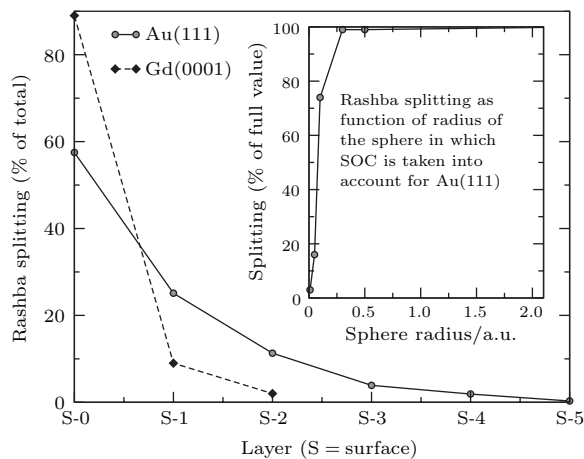


图4 Au(111)与Gd(0001)薄膜中各原子层对Rashba自旋劈裂的贡献, 最表层标记为S, 依次为S-1, S-2, ..., S-5; 插图为Au(111)表层原子中Rashba自旋劈裂对原子半径的依赖^[18]

Fig. 4. Contribution to the Rashba splitting in Au(111) and Gd(0001) arising from the individual layers of a film. The surface layer is denoted by S, deeper layers by S-1, S-2, ..., S-5; Inset: contribution to the Rashba splitting coming from a sphere around the surface atom of Au(111) as function of the sphere radius^[18].

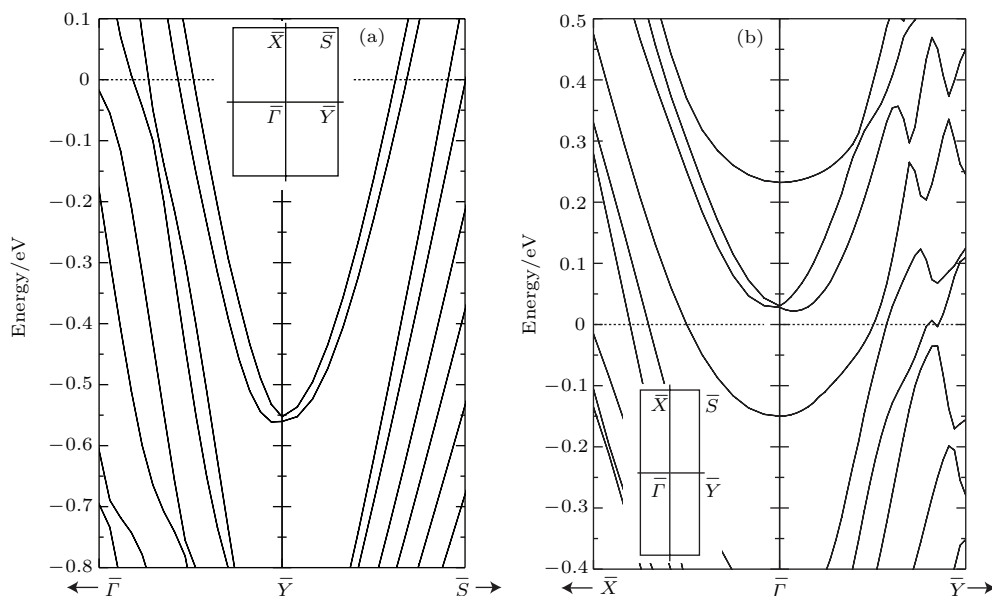


图5 (a) Au(110) (1×1) 表面布里渊区 \bar{Y} 点附近电子结构; (b) Au(110) (2×1) 表面布里渊区 $\bar{\Gamma}$ 点附近电子结构^[26]
 Fig. 5. (a) Electronic band structure around \bar{Y} in Au(110) (1×1) calculated with spin-orbit coupling; (b) electronic band structure around $\bar{\Gamma}$ in Au(110) (2×1) calculated with spin-orbit coupling^[26].

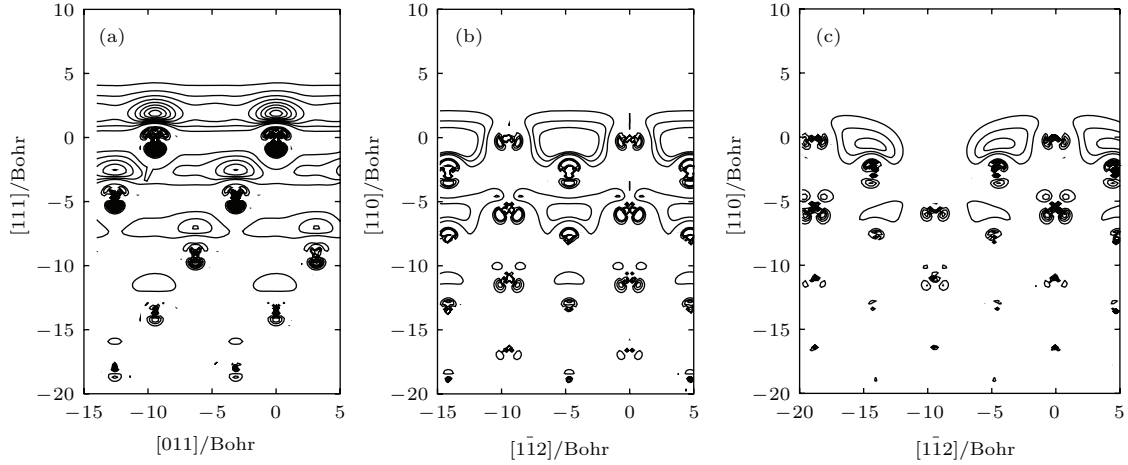


图6 (a) Au(111)表面态 $\bar{\Gamma}$ 点波函数平方 $|\psi_{SS}^{k//}|^2$; (b) Au(110) (1×1)表面态 \bar{Y} 点波函数平方; (c) Au(110) (2×1)表面态 $\bar{\Gamma}$ 点波函数平方^[26]

Fig. 6. Calculated wavefunction squared of the surface state $|\psi_{SS}^{k//}|^2$ in (a) Au(111) at $\bar{\Gamma}$, (b) Au(110) (1×1) at \bar{Y} and (c) Au(110) (2×1) at $\bar{\Gamma}$ ^[26].

Au(110) (1×1)表面态 \bar{Y} 点波函数平方, 以及 Au(110) (2×1)表面态 $\bar{\Gamma}$ 点波函数平方. 对比三个表面的态密度分布, 我们发现 Au(111)表面态主要由垂直于表面的p轨道提供, Au(110) (1×1)表面态中最表面层原子主要提供平行于表面的p轨道, 次表层原子提供了垂直于表面的p轨道, Au(110)(2×1)表面态中轨道成分与 Au(110) (1×1)类似.

通常 Rashba 自旋轨道耦合存在于布里渊区中心 Γ 点附近, Nagano等^[26]通过理论推导证明除了 Γ 点, 某些 k 点附近也可能出现 Rashba 自旋轨道耦合. 我们知道, 时间反演对称性要求 $\Theta\varepsilon(k, s) = \varepsilon(-k, -s) = \varepsilon(k, s)$, 其中 Θ 为时间反演算符, s 代表上自旋, $-s$ 代表下自旋. 如果布里渊区中的点 \bar{C} 满足 $\bar{C} = \bar{G}/2$ (\bar{G} 为倒格矢), 例如二维四方格子布里渊区的 \bar{X} 和 \bar{Y} 点, 二维六角格子布里渊区中的 M 点, 则有 $\Theta\varepsilon(k+\bar{C}, s) = \varepsilon(-k-\bar{C}, -s) = \varepsilon(-k-\bar{C}+\bar{G}, -s) = \varepsilon(-k+\bar{C}, -s) = \varepsilon(k+\bar{C}, s)$, 上述表达式表明, 在 \bar{C} 点附近也可以观察到 Rashba 自旋劈裂.

2012年, Lee等^[32]再次利用第一性原理计算研究了 Au(111)和 Ag(111)表面的 Rashba 自旋轨道耦合. 通过关闭和打开指定轨道的自旋轨道耦合作用, 他们发现 Au(111)和 Ag(111)表面态中少量存在的d轨道对 Rashba 自旋劈裂和自旋方向起决定作用. 他们将自旋轨道耦合哈密顿量根据轨道角动量分解为两部分: $H_{SO}(k) = H_{SO}^{l=1} + H_{SO}^{l=2}$. 图7是关于 Ag(111)与 Au(111)表面的计算结果, 其中图7(a)和图7(b)分别为两项自旋轨道耦合

作用都被考虑的 Ag(111)和 Au(111)表面态电子结构, 图7(c)和图7(d)分别为 Au(111)中只考虑轨道角动量 $l=1$ 和只考虑轨道角动量 $l=2$ 的电子结构. 对比图7(a)和图7(b), 可以看到 Ag(111)表面没有明显的 Rashba 自旋劈裂, Au(111)表面有很明显的自旋劈裂, 这和以往的研究结果一致. 对比图7(c)和图7(d), 发现轨道角动量 $l=2$ 的自旋轨道耦合项对自旋劈裂起决定作用, 甚至单独考虑 $l=2$ 时, 自旋劈裂比同时考虑 $l=1$ 和 2 还要明显. Lee等还进一步考虑了表面态中不同电子态对自旋劈裂能的影响, 波函数可以写为: $\psi_{nk} = \psi_{nk,s} + \psi_{nk,p} + \psi_{nk,d}$ 计算 $\langle\psi_{nk,i}|H_{SO}(k)|\psi_{nk,j}\rangle$, $j = s, p, d$ 可以确定不同轨道对自旋劈裂的贡献. 研究表明, $\langle\psi_{nk,d}|H_{SO}(k)|\psi_{nk,d}\rangle$ 对能带劈裂贡献最大, $\langle\psi_{nk,p}|H_{SO}(k)|\psi_{nk,p}\rangle$ 对能带劈裂影响很小, 并且是抑制能带劈裂.

Bi原子序数是83, 体材料是具有共价键的半金属元素. Bi(111)是 Bi薄膜在实际应用中最重要的一种, 容易通过外延生长获得. 图8(a)为 Bi(111)原子结构俯视图, 图8(b)为侧视图^[33]. Bi(111)表面通常以双层结构形成终端层, 薄膜表层原子和次表层原子层间距为1.59 Å, 如图8(b)所示, 双层之间的层间距为2.35 Å, 形成交替结构. 实验上, 在硅衬底上制备超薄铋薄膜已经得以实现^[34,35]. 利用角分辨光电子谱技术, 研究人员发现基于硅衬底的 Bi(111)薄膜(厚度 ≥ 7 个双层)的电子结构出现金属特性, 与体材料铋的半金属电子特性不同.

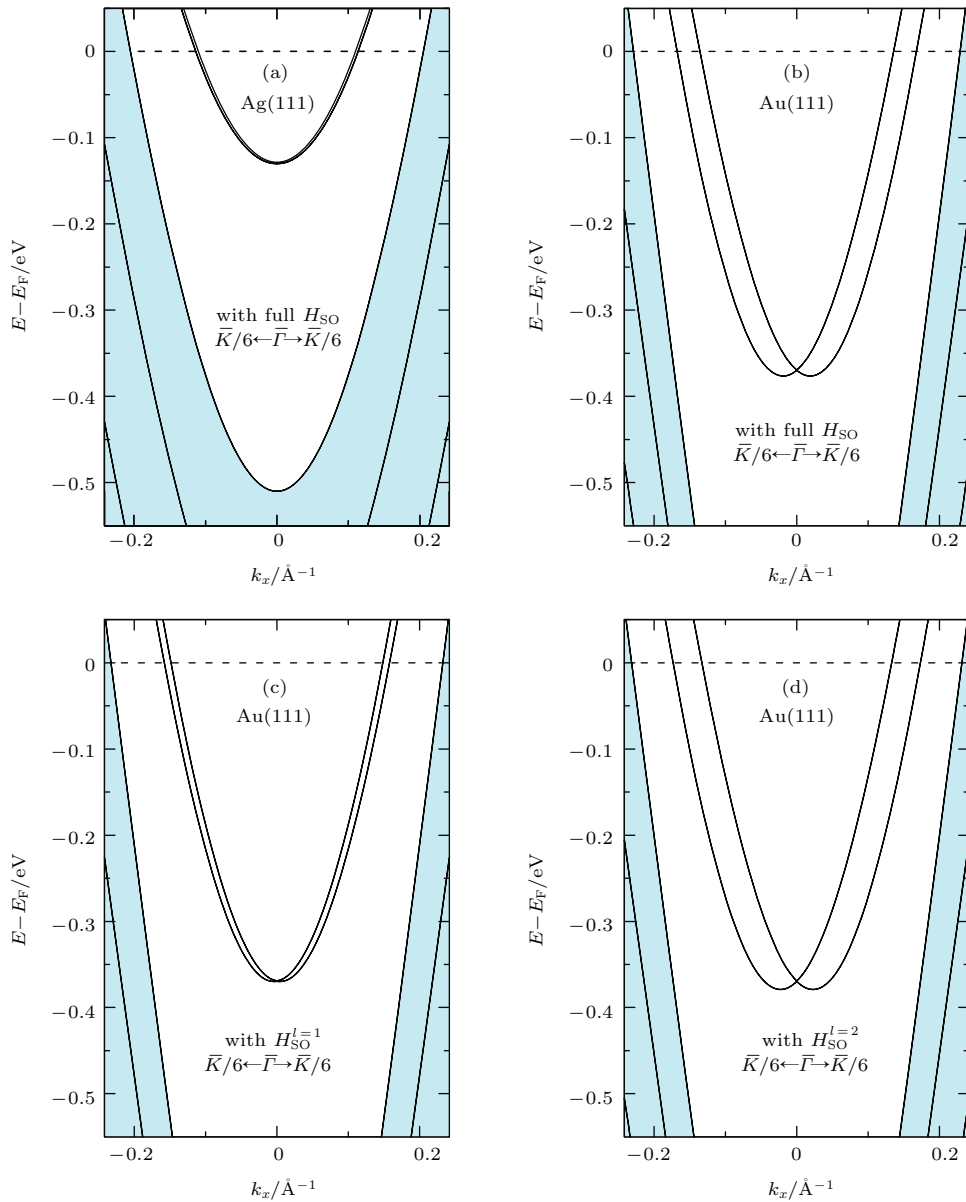


图7 (a) 30个原子层厚度的Ag(111)薄层电子结构; (b) 30个原子层厚度的Au(111)薄层电子结构; (c) 只考虑了轨道角动量 $l = 1$ 的自旋轨道耦合作用项; (d) 只考虑了轨道角动量 $l = 2$ 的自旋轨道耦合作用项 [32]

Fig. 7. Electronic band structures of (a) Ag(111) and (b) Au(111); Au(111) surface calculated (c) with only p-channel spin orbit coupling, and (d) with only d-channel spin orbit coupling [32].

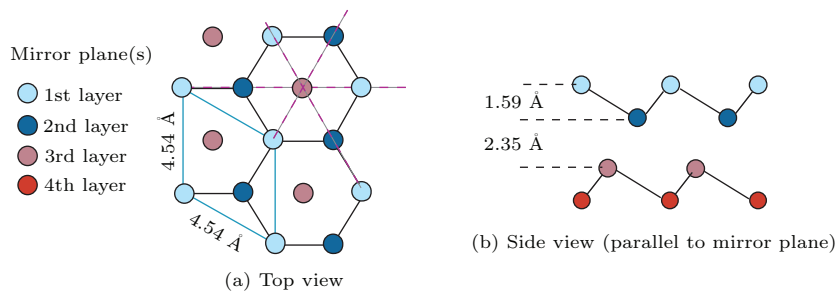


图8 Bi(111)薄膜的(a)俯视图和(b)侧视图 [33]

Fig. 8. Truncated-bulk structure of Bi(111): (a) top view of the first three atomic layers (b) side view of the first four layers along a mirror plane [33].

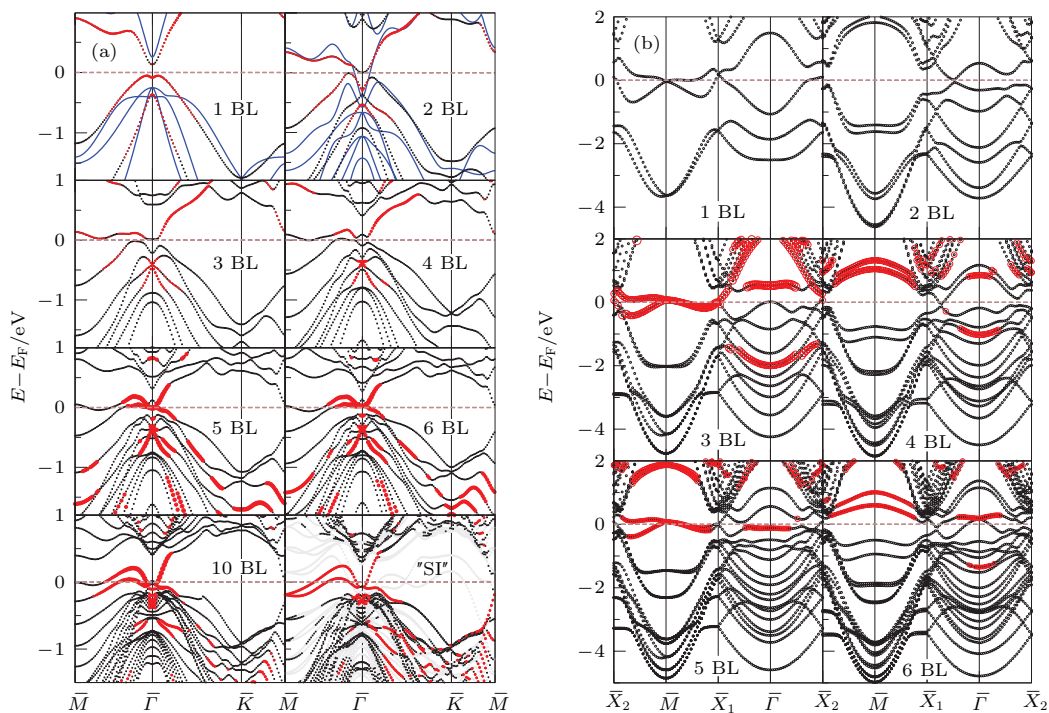


图9 (a) 不同厚度下 Bi(111) 薄膜的电子结构, “SI” 为表示半无限的 Bi(111) 薄膜; (b) 不同厚度下 Bi(110) 薄膜的电子结构 [36]

Fig. 9. (a) Band structures of Bi(111) films with one to six bilayer thickness as compared to a thicker (ten BL) film and a semi-infinite (“SI”) crystal surface; (b) band structures of Bi(110) films with one to six bilayer thickness [36].

运用第一性计算原理, Koroteev 等 [36] 对 1 到 6 个双层 Bi 的 (111) 和 (110) 两个方向上的电子结构进行了研究. 随着厚度的变换, 这些铋薄膜表现出一系列不同的电学性质, 从半导体到半金属再到金属特性. 金属态只局域在薄膜表面, 体内没有. 这些金属表面态对电导有贡献, 其显著特征是 Rashba 型自旋轨道劈裂. 图 9 (a) 和图 9 (b) 给出了不同层厚 Bi(111) 与 Bi(110) 表面态的变化 [36].

Koroteev 等 [28] 也计算了一侧 H 吸附的 22 个单层 Bi(111) 薄膜能带, H 吸附的目的是避免 Bi(111) 薄膜两个表面的相互作用. 图 10 为计算的能带结构, 黑色点线没有考虑自旋轨道耦合, 红色点线考虑了自旋轨道耦合. 紫色阴影代表没有考虑自旋轨道耦合的体带, 黄色阴影为考虑了自旋轨道耦合的体带, 紫色与黄色的交叠部分为棕色. Bi 原子的 p 轨道能级 $p_{3/2}$ - $p_{1/2}$ 的劈裂达 1.5 eV, 比 Au 中对应的能级劈裂 (0.47 eV) 大 3 倍, 因此 Bi(111) 表面出现了比 Au(111) 表面更强的 Rashba 自旋劈裂. 从图 10 可以清楚地看到, 沿着 $\bar{\Gamma}$ - \bar{M} , 自旋劈裂能量大约有 0.2 eV, 沿着 $\bar{\Gamma}$ - \bar{K} , 自旋劈裂能量更大.

这种 Rashba 自旋轨道耦合的各向异性也得到了实验证实 [37].

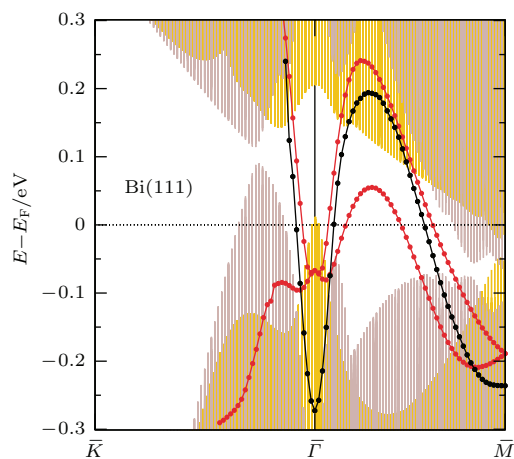


图 10 一侧 H 吸附的 22 个单层 Bi(111) 薄膜表面态, 黑色点线没有考虑自旋轨道耦合, 红色点线考虑了自旋轨道耦合; 紫色阴影代表没有考虑自旋轨道耦合的体材料能带, 黄色阴影为考虑了自旋轨道耦合的体材料能带, 紫色与黄色的交叠部分为棕色 [28]

Fig. 10. Surface states of Bi(111) calculated without (black) and with (red) spin-orbit splitting included. The shaded areas show the projection of the bulk bands obtained without (violet) and with (yellow) SOC and their superposition (brown) [28].

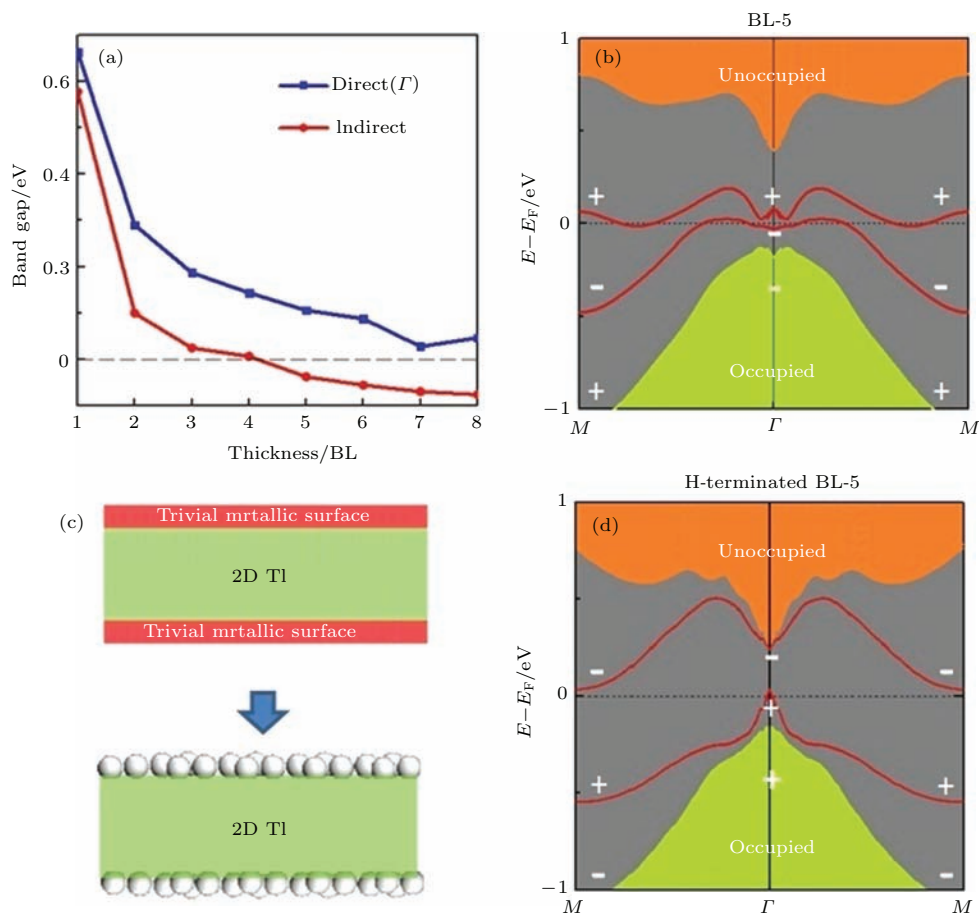


图 11 (a) 直接带隙 (Γ 点处) 和间接带隙随膜厚的变化; (b) 5 个双层 Bi(111) 薄膜的能带和奇偶性; (c) H 吸附前后 Bi(111) 薄膜表面电子态的变化示意图; (d) H 吸附后 5 个双层 Bi(111) 薄膜的能带和奇偶性 [40]
 Fig. 11. (a) The direct (Γ point) and indirect bandgap as a function of the film thickness; (b) the band structure and the parity information of 5 BLs; (c) a schematic depiction of the electronic property of a Bi (111) film before and after the H termination; (d) the band structure and the parity information of H-terminated 5 BLs [40].

Bi 薄膜还被预言是一种二维拓扑绝缘材料 [38,39]. 清华大学 Liu 等 [40] 利用第一性原理计算还发现所有的超薄 Bi 薄膜的拓扑绝缘性不依赖于薄膜厚度, 与 Murakami [38] 推测拓扑性的奇偶振荡相反. 图 11 (a) 给出了带隙随薄膜厚度的变化, 薄膜厚度小于 4 个双层时, Bi(111) 为半导体并且具有非平庸的 Z_2 拓扑数. 薄膜厚度大于 4 个双层时, 带隙变为负数, Bi(111) 从半导体转变为半金属, 半金属性来源于图 11 (b) 红线所示的两条表面态能带, 在半无限 Bi(111) 薄膜中, 这两条能带在 Γ 和 M 点处能隙为零 [36]. 如图 11 (c) 所示, 5 个双层 Bi(111) 薄膜, 可以看成是一个二维的拓扑绝缘体夹在两个平庸的金属表面中. 如果将这两个表面看作独立的二维体系, 他们的 Z_2 数为 0, 对薄膜的拓扑性没有贡献. 另一方面, 因为体材料的 Bi 是拓扑平庸绝缘体, 因此半无限的 Bi(111) 表面态并不像一

般的三维拓扑绝缘体表面态那样稳定. 对 5 个双层 Bi(111) 薄膜两侧吸附 H 原子, 可以看到, 两个表面态分离, 并且在费米能级附近打开能隙. 这意味着吸附 H 原子后膜厚大于 5 个双层的 Bi(111) 也可以成为二维拓扑绝缘体.

3 磁性金属表面的 Rashba 自旋轨道耦合作用

磁性金属表面态可同时存在铁磁交换劈裂和 Rashba 自旋劈裂, 并因此引起更多与自旋相关的物理现象 [21,41-43]. Krupin 等 [20] 以 Gd(0001) 表面为例研究了磁性金属表面 Rashba 自旋轨道耦合劈裂. 他们先基于近自由电子模型定性描述了磁性金属表面 Rashba 自旋劈裂. 如图 12 所示, 其中图 12 (a) 和图 12 (e) 为非磁性表面/界面 Rashba

自旋劈裂的剖面图和俯视图, 箭头表示自旋方向; 图 12 (b)—(d) 和 (f) 为磁性表面/界面 Rashba 自旋劈裂的剖面图和俯视图. 从图中可看出, 在磁性表面/界面 Rashba 自旋劈裂呈现出各向异性. 若磁化轴沿着 y 方向, 则在 k_x 方向有明显的 Rashba 自旋劈裂, 在 k_y 方向 Rashba 自旋劈裂消失.

基于第一性原理计算, Krupin 等 [20] 对铁磁金属 Gd(0001) 表面态进行了计算研究. Gd(0001) 表面态主要是由 d 轨道形成多数自旋态, 图 13 显示了 Gd(0001) 表面电子结构, 为了显示 Rashba 自旋劈裂, 图中也给出了非磁假设下的少数自旋态. 由图 13 (a) 可知, Gd(0001) 表面态中 Rashba 自旋劈裂很弱. 表面吸附氧原子后, 界面 Rashba 自旋劈裂显著增强, 并且多数自旋态与少数自旋态 Rashba 自旋劈裂能量相反. 研究还发现纯净 Gd(0001) 表面态主要由第一层 Gd 原子贡献, O/Gd(0001) 表面, O/Gd 层与第二层 Gd 发生较明显的分离, 表面态由 O/Gd 层与第二层 Gd 原子共同贡献, 并且 Rashba 自旋劈裂主要来自第二层 Gd 原子.

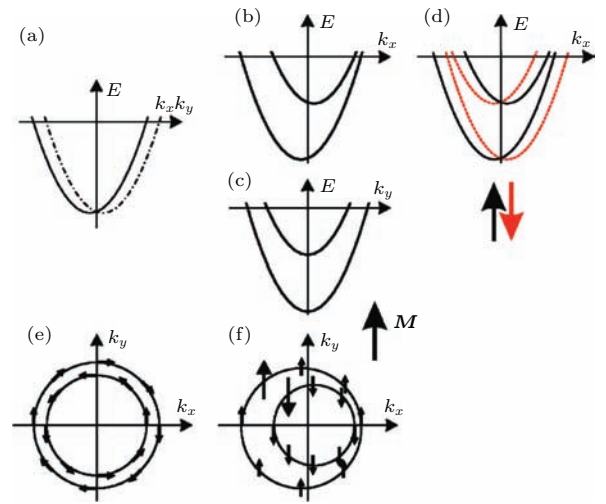


图 12 近自由电子模型下 Rashba 自旋轨道耦合效应的定性描述 (a), (e) 非磁性表面/界面 Rashba 自旋轨道耦合劈裂示意图; (b), (c), (d), (f) 铁磁表面/界面 Rashba 自旋轨道耦合与铁磁交换共同作用下能带劈裂示意图, y 轴为磁化轴 [20]

Fig. 12. Nearly-free-electron model showing the qualitative difference between the Rashba effect at (a) and (e) a nonmagnetic and (b)–(d) and (f) a ferromagnetic surface (interface) in the x, y plane, with an in-plane magnetization $M//y$ [20].

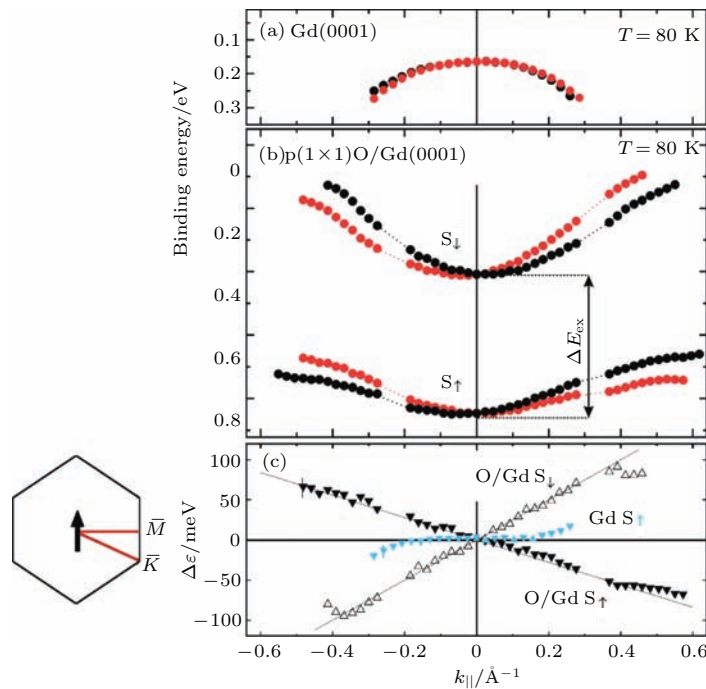


图 13 (a) 实验测量的 Gd(0001) 表面沿 $\bar{\Gamma}$ - \bar{M} 路径的多数自旋表面态色散关系; (b) $p(1 \times 1)$ O/Gd(0001) 界面沿 $\bar{\Gamma}$ - \bar{K} 路径多数自旋态 (S_{\uparrow}) 与少数自旋态 (S_{\downarrow}); 布里渊区中心交换能 $\Delta E_{\text{ex}} = 450$ meV, 红色与黑色代表相反的自旋态; (c) 从 (a) 与 (b) 中获得的 Rashba 自旋劈裂能量, 符号 ∇ (Δ) 代表多数 (少数) 自旋态 [20]

Fig. 13. Experimental dispersion of the (a) majority spin surface state of Gd(0001) along $\bar{\Gamma}$ - \bar{M} ; and (b) exchange-split majority spin (S_{\uparrow}) and minority spin (S_{\downarrow}) states of of $p(1 \times 1)$ O/Gd(0001) along the $\bar{\Gamma}$ - \bar{K} , the exchange splitting ΔE_{ex} is 450 meV at the SBZ center, red and black symbols: opposite magnetization directions; (c) Rashba splitting $\Delta\epsilon$ obtained from the data in (a) and (b); ∇ (Δ) symbols refer to majority (minority) spin states [20].

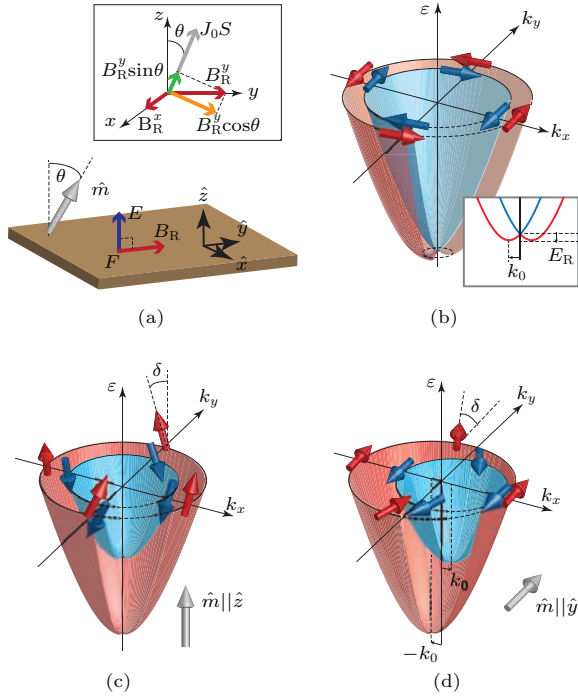


图 14 (a) 电场垂直于铁磁表面, 磁序参量 \hat{m} 与 z 方向夹角为 θ , 无论电子波矢 k 的方向如何, Rashba 自旋轨道耦合产生的有效磁场 B_R 都在 x - y 平面内; (b) 非磁性金属的 Rashba 自旋劈裂能带; (c) 当 \hat{m} 垂直于磁性金属表面时, 电子自旋会相对于 z 方向发生一个偏转角 δ , 投影在 x - y 平面就如 (b) 图所示; (d) 当 \hat{m} 平行于面内 \hat{y} 方向时, 多数自旋态与少数自旋态分别沿 \hat{x} 轴反向移动, 自旋相对于 \hat{m} 的偏转角不是一个常数, 在 0 与某个最大值之间, 其中 0 对应于自旋沿着 \hat{x} 方向, 最大值对应于自旋沿着 \hat{y} 方向 [44]

Fig. 14. (a) The electric field is perpendicular to the ferromagnet surface while the order parameter direction \hat{m} , is defined by the angle θ relative to \hat{z} , whatever the direction of k , the Rashba magnetic field B_R lies in the \hat{x} - \hat{y} plane; (b) the Rashba split bands of a nonmagnetic metal; (c) for a perpendicular \hat{m} the electron spins make a constant angle δ to the vertical such that the projection is as in (b); (d) same but for \hat{m} parallel to the plane, with \hat{m} along the \hat{y} -direction the majority and minority Fermi seas shift along the \hat{x} -axis in opposite directions, the tilt of the spin relative to \hat{m} is no longer a constant being zero along the \hat{x} -axis and a maximum along the \hat{y} -axis [44].

在磁性金属表面, 通过 Rashba 自旋轨道耦合有可能实现电学方法调控磁性. 2014 年, Barnes 等 [44] 通过理论模型方法研究了基于 Rashba 自旋轨道耦合作用调控垂直磁晶各向异性. 该理论指出, 铁磁/金属、铁磁/氧化物界面处的内建电场 E_{int} 可产生较大的磁晶各向异性性能, 与此同时界面电场大小也可以通过外加电场 E_{ext} 调控, Rashba 自旋轨道耦合对磁晶各向异性性能的调控与电场的平方 $(E_{\text{int}} + E_{\text{max}})^2$ 相关. 哈密顿量可写为

$$H = \frac{p^2}{2m} - J_0 S \cdot \sigma + \frac{\alpha_R}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x),$$

其中 p 为电子动量, σ 为泡利算符, $\alpha_R = e\eta_{\text{so}}E$ 为自旋轨道耦合参数, E 为表面电场, η_{so} 为原子自旋轨道耦合系数, J_0 为磁交换常数. 图 14 (a) 给出了金属表面 Rashba 自旋轨道耦合产生的有效磁场 B_R 以及 $J_0 S$ 示意图; 图 14 (b) 为非磁性表面 Rashba 自旋轨道耦合作用下自旋劈裂能带; 图 14 (c) 和图 14 (d) 分别为磁矩 $\hat{m} // \hat{z}$ 与 $\hat{m} // \hat{y}$ 时能带示意图. 对于非磁性表面, 能量色散关系为: $\varepsilon_{k\sigma} = \frac{\hbar^2}{2m}(k - \sigma k_0)^2 - E_R$; 磁性表面能量色散关系为

$$\varepsilon_{k\sigma} = \frac{\hbar^2}{2m} [(k_x - \sigma k_0 \sin \theta)^2 + k_y^2] - E_R \sin^2 \theta - \sigma [(J_0 S)^2 + \alpha_R^2 (k_x^2 \cos^2 \theta + k_y^2)]^{1/2}.$$

在 $(J_0 S)^2 > (\alpha_R k_x)^2$ 时, 得到磁晶各向异性能与 Rashba 自旋轨道耦合的关系: $E_{\text{an}} = E_R \left[1 - \frac{2T}{J_0 S} \right] \cos^2 \theta$, 其中 $T = \frac{\hbar^2}{2m} (\langle k_x^2 \rangle_{\uparrow} - \langle k_x^2 \rangle_{\downarrow})$.

4 金属表面 Rashba 自旋轨道耦合的电学方法调控

在半导体异质结中, Rashba 自旋轨道耦合强度可由栅极电压调控 [17,45], 这也是 Rashba 自旋轨道耦合比其他自旋轨道耦合作用更受关注的原因. 金属表面的 Rashba 自旋轨道耦合能否通过外加电场来调控? 2006 年, Bihlmayer 等 [18] 以 Lu(0001) 为例研究了电场对金属表面 Rashba 自旋轨道耦合的调控. 在金属表面存在垂直于表面的内建电场, 该电场与金属的功函数相关. 对金属表面施加外加电场时, 该外加电场可增加或降低表面态波函数的对称性, 进而增强或减弱表面 Rashba 自旋轨道耦合. 图 15 (a) 是 12 层 Lu(0001) 的能带结构, 其中表面态用实心圆表示, 费米能级之上在 M 点和 Γ 点附近都有较多表面态分布. 图 15 (b) 中 (a), (b) 是 M 点和 Γ 点表面态对应的电荷密度分布, (c), (d) 为外加电场为 -0.46 V/\AA 时 M 点和 Γ 点电荷密度的变化. 从图 15 (b) 可以看到电场作用下, M 点处电荷密度变化较小, 这意味着电场对 M 点 Rashba 自旋轨道耦合影响较小; Γ 点处电场对电荷密度有较明显的影响. 因此电场的作用与表面态具体特性也有很大关系.

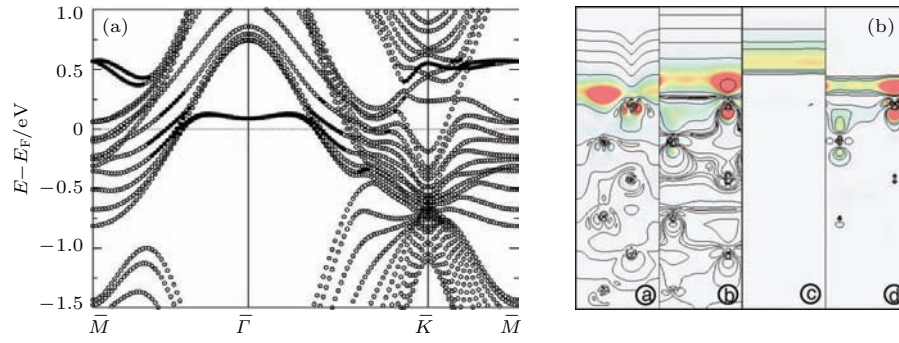


图15 (a) 12层Lu(0001)能带, 其中表面态由实心圆表示; (b) ①, ②是M点和 Γ 点表面态对应的电荷密度分布; ③, ④外加电场为 -0.46 V/\AA 时M点和 Γ 点电荷密度的变化^[18]

Fig. 15. (a) Band structures of a relaxed 12 layer Lu(0001) film, the top panel shows a comparison of a calculation without (empty circles) and with (filled circles) spin-orbit coupling (SOC); (b) charge density of the surface state of Lu(0001) at the M-point ① and Γ -point ②; charge density increase ③ and decrease ④ of the surface state at Γ , when an electric field of -0.46 V/\AA is applied^[18]

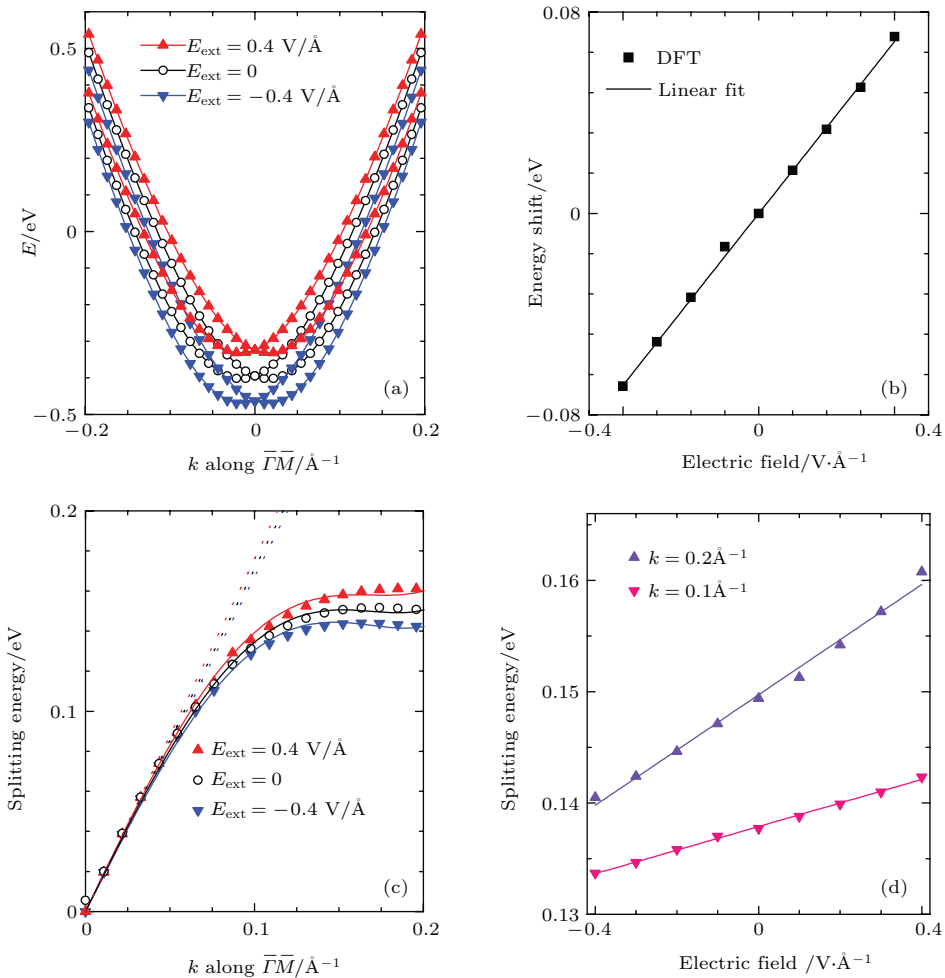


图16 (a) 电场为 $-0.4, 0, 0.4 \text{ V/\AA}$, 22层Au(111)能带图; (b) 表面态 Γ 点随电场的上移和下移; (c) Rashba自旋劈裂能量随波矢的变化; (d) 波矢 $k = 0.2 \text{ \AA}^{-1}, 0.1 \text{ \AA}^{-1}$ 时, Rashba自旋劈裂能量随电场的变化^[47]

Fig. 16. (a) The surface Rashba splitting bands under the electric fields $E_{\text{ext}} = 0$ (open circles), 0.4 V/\AA (up-triangles), and -0.4 V/\AA (down-triangles); (b) electric-field dependence of the energy shift (squares); (c) Rashba splitting energies under the electric fields $E_{\text{ext}} = 0$ (open circles), -0.4 V/\AA (down-triangles), and 0.4 V/\AA (up-triangles); (d) Rashba spin splitting energy versus the electric field, under the different wave vectors $k = 0.1 \text{ \AA}^{-1}$ (down-triangles) and 0.2 \AA^{-1} (up-triangles)^[47].

直接对金属表面施加外电场也可以调控表面 Rashba 自旋轨道耦合强度^[46,47]. 2013年, 我们利用第一性原理计算研究了电场对 Au(111) 表面 Rashba 自旋轨道耦合的调控^[47]. 图 16 (a) 给出了 22 层 Au(111) 表面态在外加电场分别为 $-0.4, 0, 0.4 \text{ V/\AA}$ 时表面态的变化, 这里我们定义正电场背离表面, 负电场指向表面. 计算结果表明, 正向电场使表面电子向体内移动, 负向电场使电子更加趋向表层, 从能带结构看, 正向电场使得表面态能级上移, 负向电场使得表面态能级下移. 图 16 (b) 给出了表面态 Γ 点随外加电场的变化, 结果显示 Γ 点移动与外加电场成线性关系. 研究还发现 Au(111) 表面的 Rashba 自旋劈裂同时存在与波矢 k 成线性关系的一阶项和非线性关系的高阶项. 考虑了高阶项后, 自旋轨道耦合的展开形式为

$$H_{\text{soc}} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \left(1 - \frac{1}{4m^2c^2} p^2 + \frac{1}{16m^4c^4} p^4 \dots \right) \times (\nabla V \times p) \cdot \sigma.$$

图 16 (c) 中点与实线分别是线性与非线性(动量 4 阶)拟合结果, 空心三角代表第一性原理计算结果. 从图中可以看到非线性拟合与第一性原理计算结果符合较好. 通过进一步的研究, 我们还发现外加电场只对 Rashba 自旋轨道耦合的线性项有调控作用, 进行能带成分分析后发现这是由于偏离 Γ 点后体态成分逐渐增加, 而由于屏蔽效应电场对它们的影响很小, 因此波函数中受外加电场影响的有效成分在逐渐减少.

2014年, Ishida 等^[48]利用格林函数方法对 Au(111), Ag(111), Cu(111), 以及 Sb(111) 的半无限结构进行了研究, 半无限结构的好处在于可以解决一些在有限厚度薄膜中难以处理的问题. 在 Au(111) 中, Ishida 等研究了 Rashba 自旋劈裂能量与波矢的非线性关系, 以及表面态向体态过渡的临界波矢. 图 17 (a) 和图 17 (b) 分别给出了 Au(111) 半无限表面的表面态能量色散关系和自旋劈裂能. 从图 17 (b) 可以清楚地看到, 在波矢 k_x 较大时, 自

旋劈裂能量与波矢已经明显偏离了线性关系. 这种偏离线性关系的现象一方面是因为自旋轨道耦合高阶项的作用, 另一方面是因为表面态波函数的衰减对波矢 k 的依赖关系. 这种 Rashba 自旋轨道耦合的高阶项在半导体材料中也有报道^[49].

除了直接对金属表面施加外电场^[50], 在金属/铁电体复合材料界面, 利用铁电极化翻转也可有效调控界面处 Rashba 自旋轨道耦合强度^[51,52]. 2010 年, Abdelouahed 等^[52]利用第一性原理计算研究了 Bi/BaTiO₃ 复合体系, 研究发现 BaTiO₃ 铁电极化翻转对 Bi-6 p 轨道形成的 Rashba 自旋劈裂表面态有一定影响. 图 18 是 Bi 原子吸附在 BaTiO₃(001) 表面的俯视图和侧视图, (a), (b) 为 Bi 原子吸附在 TiO₂ 层上; (c), (d) 为 Bi 原子吸附在 BaO 层.

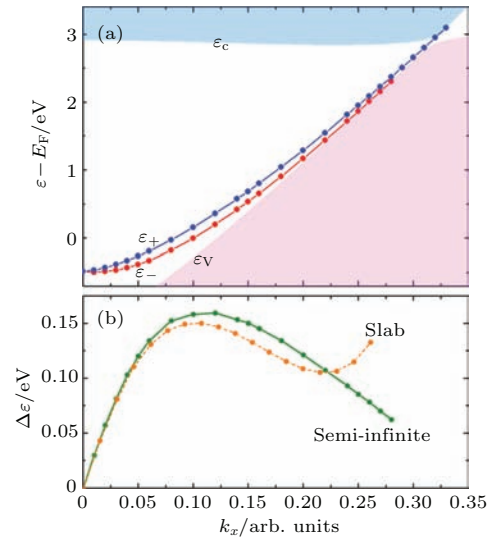


图 17 (a) Au(111) 表面态沿着 Γ - K 路径的能量色散关系, $\epsilon_{\pm}(k_x)$; (b) 半无限 Au(111) 表面沿 Γ - K 路径的自旋劈裂能 $\Delta\epsilon = \epsilon_+(k_x) - \epsilon_-(k_x)$ 与 35 层 Au(111) 薄膜的自旋劈裂能^[48]

Fig. 17. (a) Energy dispersion of the L-gap surface states along Γ - K , $\epsilon_{\pm}(k_x)$; (b) spin-splitting energy $\Delta\epsilon = \epsilon_+(k_x) - \epsilon_-(k_x)$ for a semi-infinite Au(111) surface along the Γ - K direction (solid line) and calculated by using a 35-layer slab is shown by dashed line^[48].

表 1 TiO₂ 为接触面时 Bi/BaTiO₃ 界面 Rashba 自旋轨道耦合效应. 在铁电极化分别为 p_{\uparrow} 和 p_{\downarrow} 时, 劈裂波矢 k_R , Rashba 能量 E_R , 有效质量 m^* , 以及 Rashba 参数 α_R 的变化^[51]

Table 1. Rashba effect at Bi/BaTiO₃ interface, with a TiO₂ termination contacting with Bi. The splitting k_R , the Rashba energy E_R , the effective mass m^* , and the Rashba parameter α_R for ferroelectric polarization p_{\uparrow} and p_{\downarrow} ^[51].

	$\bar{\Gamma}$ - \bar{M}				$\bar{\Gamma}$ - \bar{X}			
	$k_R/\text{\AA}^{-1}$	E_R/eV	$m^*(m_c)$	$\alpha_R/\text{eV}\cdot\text{\AA}^{-1}$	$k_R/\text{\AA}^{-1}$	E_R/eV	$m^*(m_c)$	$\alpha_R/\text{eV}\cdot\text{\AA}^{-1}$
p_{\uparrow}	0.22	0.16	-1.14	1.45	0.25	0.18	-1.36	1.42
p_{\downarrow}	0.23	0.16	-1.22	1.39	0.27	0.18	-1.48	1.36

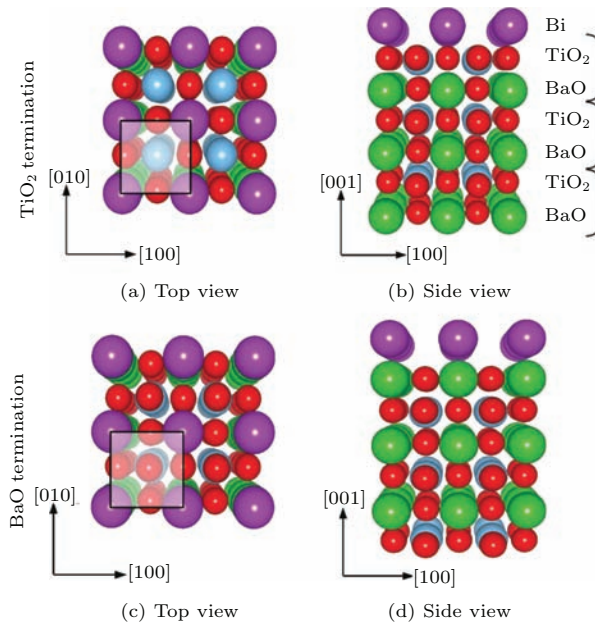


图 18 TiO₂ 层为接触面的 Bi/BaTiO₃ 的 (a) 俯视图和 (b) 侧视图; BaO 层为接触面的 Bi/BaTiO₃ 的 (c) 俯视图和 (d) 侧视图; 紫色球代表 Bi 原子, 红色球代表 O 原子, 绿色球代表 Ba 原子, 蓝色球代表 Ti 原子 [52]

Fig. 18. Perspective view of the surface geometries of Bi/BaTiO₃ (001) with TiO₂ termination top row and BaO termination bottom row. The left right column shows a top side view. The atomic species are indicated by color and size of the spheres (Bi, violet, large; Ba, green large; Ti, blue, medium sized; and O, red, small); confer legend in panel [52].

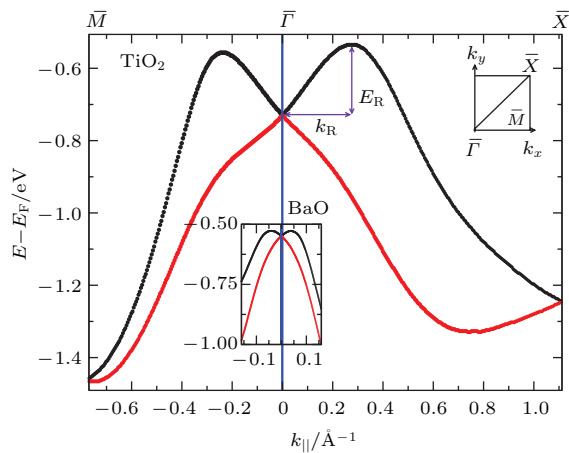


图 19 铁电极化为 p_↓ 时 Bi/BaTiO₃ 的表面态, 主图为 TiO₂ 接触面的计算结果, 插图为 BaO 接触面的计算结果, k_R 为劈裂波矢, E_R 为 Rashba 能量 [52]

Fig. 19. (color online) Rashba splitting of Bi 6p surface states in Bi/BaTiO₃. The main panel displays the dispersion of the surface states for TiO₂-terminated BaTiO₃ (unrelaxed, p_↓). The dispersion for BaO-terminated BaTiO₃ is depicted in the central inset. Note the strongly reduced Rashba splitting k_R in the latter case [52].

图 19 给出了铁电极化为 p_↓ 时 Bi/BaTiO₃ 的表面态, 主图为 TiO₂ 接触面的计算结果, 插图为 BaO 接触面的计算结果, 劈裂波矢 k_R 和 Rashba 能量 E_R 标注在图中. 从图 19 可以看出, TiO₂ 为接触面的 Rashba 自旋劈裂比 BaO 为接触面的 Rashba 自旋劈裂要大很多. 表 1 给出了 TiO₂ 为接触面, 铁电极化分别为 p_↑ 和 p_↓ 时, 劈裂波矢 k_R, Rashba 能量 E_R, 有效质量 m*, 以及 Rashba 参数 γ_R 的变化. 若定义劈裂波矢 k_R 的变化为自旋轨道耦合强度的变化, 则极化方向由正变负时, 沿着 Γ-M 和 Γ-X 自旋轨道耦合分别变化了 4.5% 和 5.5% [51].

5 金属表面 Rashba 自旋轨道耦合的表面吸附调控

2004 年, Andreev 等 [53] 研究了 Au(111) 表面吸附惰性气体 (Ar, Kr, Xe) 对表面态的调控. 研究发现, 吸附惰性气体前后, 表面态位置发生 50—150 meV 的移动. 图 20 给出了紫外光电子能谱测量的不同浓度 Xe 吸附下表面态的移动.

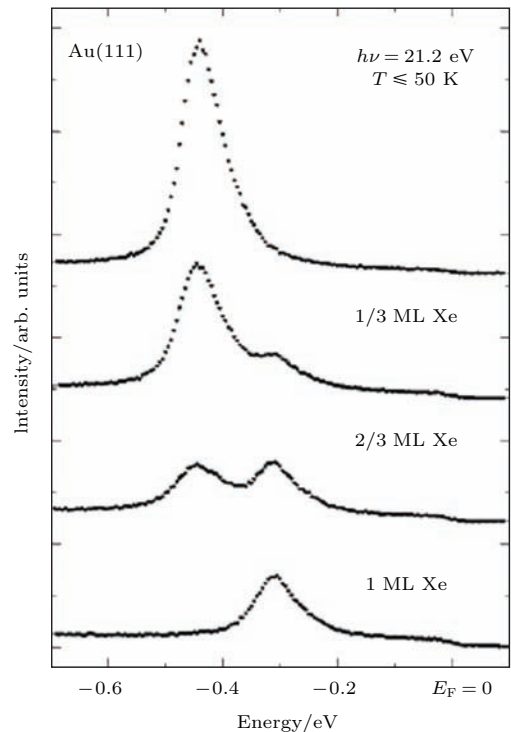


图 20 紫外光电子能谱测量结果: 不同浓度 Xe 吸附下表面态能带的移动 [53]

Fig. 20. UPS surface-state signal in normal emission of clean Au(111) and with increasing coverages of Xe [53].

最近我们开发了选择轨道加场法, 该方法旨在引入一种特殊的外势场, 这种势场可以加在指定轨道上^[54,55]. 首先我们定义投影算符 $|inlm\sigma\rangle\langle inlm\sigma|$, 这个算符允许外势场 V_{ext} 影响原子轨道 $|inlm\sigma\rangle$, 这里 i 代表某个特定原子, n, l, m 和 σ 分别表示主量子数、轨道量子数、磁量子数和自旋态. 新的哈密顿量可以表示为

$$H^{\text{OSEP}} = H_{\text{KS}}^0 + |inlm\sigma\rangle\langle inlm\sigma| V_{\text{ext}},$$

这里 H_{KS}^0 代表原始的 Kohn-Sham 哈密顿量, 这种选择轨道加场法和第一性原理计算中经常用到的 DFT+ U 方法类似^[56], 都是把外势场作用到某一个特定的轨道上, 但是由于这种外势场具有不同的物理含义, 因此可以用在强关联之外的体系. 利用选择轨道加场法, 我们研究了 Au(111) 表面 Rashba 自旋轨道耦合对表面态中轨道成分的依赖关系. 我们对表面态中的 d 轨道施加外电场使得 d 轨道态向低能移动, 表面态中的 d 轨道成分减少, 导致 Rashba 自旋轨道耦合减弱, 这和 Lee 等^[32] 的结论一致.

调控金属表面 Rashba 自旋轨道耦合既可以通过表面吸附^[30,57-59], 也可以设计特殊的表面合金结构^[60] 来实现. 2007 年, Ast 等^[61] 在 Ag(111) 表面掺入重原子 Bi, 图 21 为表面合金结构示意图, 从侧视图 21 (b) 可以看出, 表面合金中 Bi 原子位置略高于 Ag 原子. 长程有序的 Bi/Ag(111) 合金态一方面保证了二维电子态的存在, 另一方面轻重原子的搭配形成了较大的面内电势梯度, 这就可能形成较大的自旋劈裂和垂直于表面的自旋极化. 表 2 提供了几种典型材料的 Rashba 自旋轨道耦合

强度对比. 相比于半导体异质结、Ag(111) 表面、Au(111) 表面以及 Bi(111) 表面, Bi/(111) 合金表面的 Rashba 自旋轨道耦合强度要大很多. 图 22 为 Bi/Ag(111) 表面合金能带结构, 左栏为角分辨率光电子能谱仪测量结果, 右栏为第一性原理计算结果. 从图 22 可以看到, 第一对 Rashba 自旋劈裂态 (s 与 p_z 轨道) 与第二对自旋劈裂态 (p_x, p_y 轨道) 在能量 $E = -0.4$ eV, $k_x = \pm 0.2 \text{ \AA}^{-1}$ 附近发生杂化. $k_y = 0.14 \text{ \AA}^{-1}$ 和 0.18 \AA^{-1} 时, 实验结果与理论值也符合较好. 研究还发现 Bi/Ag(111) 表面态比较局域地分布在表层原子, 不像 Au(111) 表面态会扩展到体内.

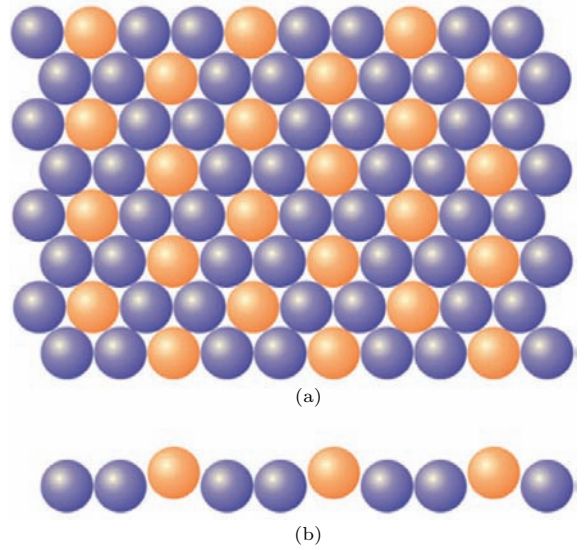


图 21 Bi/Ag(111) 表面合金原子结构示意图 (a) 俯视图; (b) 侧视图; 其中橙色为 Bi 原子, 蓝色为 Ag 原子^[61]
 Fig. 21. (a) Schematic top view of the Bi/Ag(111) surface alloy; (b) side view of the schematic [Bi, light ray (orange); Ag, dark gray (blue)]^[61].

表 2 几种材料 Rashba 自旋劈裂的对比, 其中 E_R 为 Rashba 能量, k_0 为劈裂波矢, α_R 为 Rashba 自旋轨道耦合常数^[61]

Table 2. Selected materials and parameters characterizing the spin splitting: Rashba energy of split states E_R , wave number offset k_0 , and Rashba parameter α_R .

Material	E_R/meV	$k_0/\text{\AA}^{-1}$	$\alpha_R/\text{eV}\cdot\text{\AA}^{-1}$	Reference
InGaAs/InAlAs heterostructure	< 1	0.028	0.07	[62]
Ag(111) surface state	< 0.2	0.004	0.03	[63,64]
Au(111) surface state	2.1	0.012	0.33	[63, 25]
Bi(111) surface state	~14	~0.05	~0.56	[28]
Bi/Ag(111) surface alloy	200	0.13	3.05	[61]

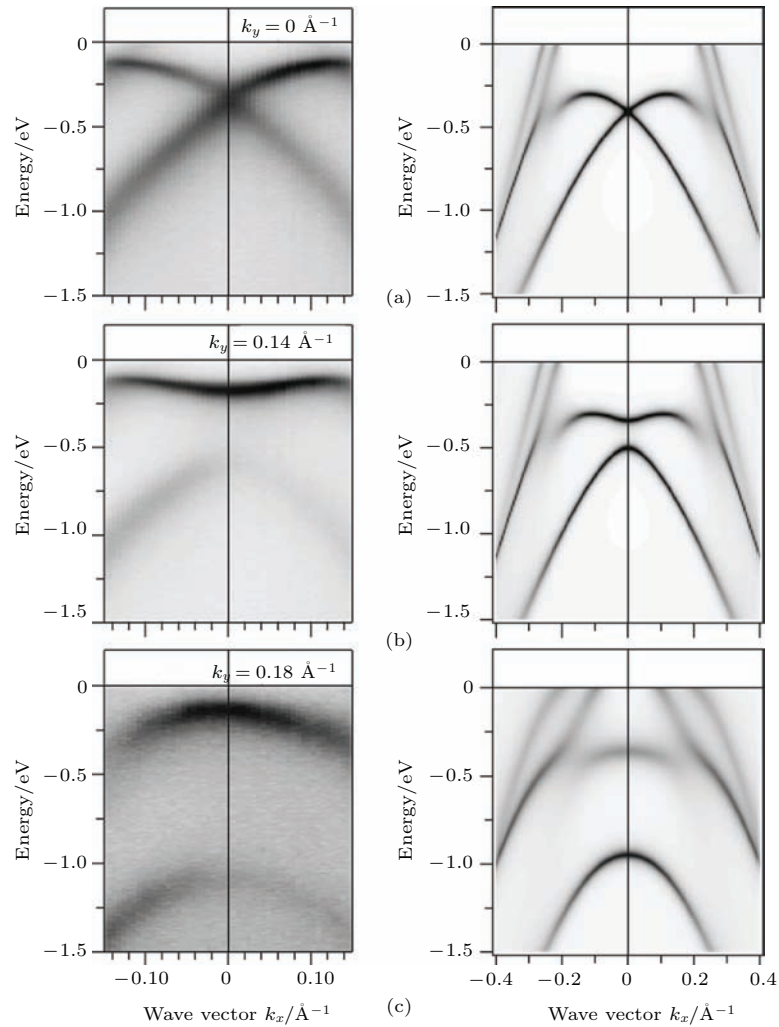


图 22 Bi/Ag(111) 能带结构 左栏为角分辨率光电子能谱仪测量结果; 右栏为计算结果 [61]
 Fig. 22. Band structure measurements by ARPES (left-hand panels) and calculations (right-hand panels) [61].

6 结 论

金属表面 Rashba 自旋轨道耦合涉及众多基本物理内容, 包括表面电势梯度、表面波函数不对称性、原子自旋轨道耦合、表面态轨道成分等, 这使得对其物理机理和应用的研究经历了一个长期探索和不断进步的过程. 经过近 20 多年的研究, 人们对金属表面 Rashba 自旋轨道耦合的认识越来越深入, 在调控其耦合强度方面也提出了很多方法, 如直接加电场方法、利用金属/铁电体界面、表面吸附、表面合金等. 通过这些方法, 已经实现了对金属表面 Rashba 自旋轨道耦合的有效调控. 如今自旋轨道耦合在电控磁性领域发挥了越来越重要的作用, 金属表面作为自旋电子学器件不可或缺的角色也必将为未来器件发展带来更多契机.

参考文献

- [1] Han X F, et al 2014 *NanoScience and Technology: Introduction of Spintronics* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [韩秀峰等 2014 纳米科学与技术: 自旋电子学导论 (北京: 科学出版社)]
- [2] Datta S, Das B 1990 *Appl. Phys. Lett.* **56** 665
- [3] Koga T, Nitta J, Takayanagi H 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88**
- [4] Gong S J, Yang Z Q 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 033706
- [5] Nitta J, Koga T 2003 *J. Supercond.* **16** 689
- [6] Hirsch J E 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1834
- [7] Wunderlich J, Kaestner B, Sinova J, Jungwirth T 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 047204
- [8] Kato Y K, Myers R C, Gossard A C, Awschalom D D 2004 *Science* **306** 1910
- [9] Seki T, Hasegawa Y, Mitani S, Takahashi S, Imamura H, Maekawa S, Nitta J, Takahashi K 2008 *Nat. Mater.* **7** 125
- [10] Kimura T, Otani Y, Sato T, Takahashi S, Maekawa S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 156601
- [11] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95**

- [12] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757
- [13] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [14] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802
- [15] Koga T, Nitta J, Marcet S 2003 *J. Supercond.* **16** 331
- [16] Kohda M, Shibata T, Nitta J 2010 *Jpn. J. Appl. Phys.* **49**
- [17] Nitta J, Akazaki T, Takayanagi H, Enoki T 1998 *Physica E* **2** 527
- [18] Bihlmayer G, Koroteev Y M, Echenique P M, Chulkov E V, Blügel S 2006 *Surf. Sci.* **600** 3888
- [19] Bendounan A, Aït-Mansour K, Braun J, Minár J, Bornemann S, Fasel R, Gröning O, Sirotti F, Ebert H 2011 *Phys. Rev. B* **83** 195427
- [20] Krupin O, Bihlmayer G, Starke K, Gorovikov S, Prieto J E, Döbrich K, Blügel S, Kaindl G 2005 *Phys. Rev. B* **71** 201403
- [21] Krupin O, Bihlmayer G, Döbrich K M, Prieto J E, Starke K, Gorovikov S, Blügel S, Kevan S, Kaindl G 2009 *New J. Phys.* **11** 013035
- [22] Varykhalov A, Marchenko D, Scholz M R, Rienks E D L, Kim T K, Bihlmayer G, Sánchez-Barriga J, Rader O 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 066804
- [23] Gong S J, Ding H C, Zhu W J, Duan C G, Zhu Z, Chu J 2013 *Sci. China: Phys. Mech. Astron.* **56** 232
- [24] Winkler R 2003 *Spin-orbit Coupling Effects in Two-dimensional Electron and Hole Systems* (Berlin, New York: Springer)
- [25] LaShell S, McDougall B A, Jensen E 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3419
- [26] Nagano M, Kodama A, Shishidou T, Oguchi T 2009 *J. Phys.: Condens. Matter* **21** 064239
- [27] Nicolay G, Reinert F, Hüfner S, Blaha P 2001 *Phys. Rev. B* **65** 033407
- [28] Koroteev Y M, Bihlmayer G, Gayone J E, Chulkov E V, Blügel S, Echenique P M, Hofmann P 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 046403
- [29] Shikin A M, Rybkina A A, Rusinova M V, Klimovskikh I I, Rybkin A G, Zhizhin E V, Chulkov E V, Krasovskii E E 2013 *New J. Phys.* **15** 125014
- [30] Gong S J, Li Z Y, Yang Z Q, Gong C, Duan C G, Chu J H 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 043704
- [31] Mazzeo R, Corso A D, Tosatti E 2008 *Surf. Sci.* **602** 893
- [32] Lee H, Choi H J 2012 *Phys. Rev. B* **86** 045437
- [33] Hofmann P 2006 *Prog. Surf. Sci.* **81** 191
- [34] Nagao T, Sadowski J T, Saito M, Yaginuma S, Fujikawa Y, Kogure T, Ohno T, Hasegawa Y, Hasegawa S, Sakurai T 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 105501
- [35] Krenzer B, Hanisch-Blicharski A, Schneider P, Payer T, Möllenbeck S, Osmani O, Kammler M, Meyer R, Horn-von Hoegen M 2009 *Phys. Rev. B* **80** 024307
- [36] Koroteev Y M, Bihlmayer G, Chulkov E V, Blügel S 2008 *Phys. Rev. B* **77** 045428
- [37] Ohtsubo Y, Mauchain J, Faure J, Papalazarou E, Marsi M, Le Fèvre P, Bertran F, Taleb-Ibrahimi A, Perfetti L 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 226404
- [38] Murakami S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 236805
- [39] Wada M, Murakami S, Freimuth F, Bihlmayer G 2011 *Phys. Rev. B* **83** 121310
- [40] Liu Z, Liu C X, Wu Y S, Duan W H, Liu F, Wu J 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 136805
- [41] Xu L, Zhang S 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 07C501
- [42] Li Y X, Guo Y, Li B Z 2005 *Phys. Rev. B* **71** 012406
- [43] Xing M J, Jalil M B A, Tan S G, Jiang Y 2012 *AIP Advances* **2** 032147
- [44] Barnes S E, Ieda J I, Maekawa S 2014 *Sci. Rep.* **4** 4105
- [45] Nitta J, Bergsten T 2007 *IEEE T. Electron. Dev.* **54** 955
- [46] Park S R, Kim C H, Yu J, Han J H, Kim C 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 156803
- [47] Gong S J, Duan C G, Zhu Y, Zhu Z Q, Chu J H 2013 *Phys. Rev. B* **87** 035403
- [48] Ishida H 2014 *Phys. Rev. B* **90** 235422
- [49] Yang W, Chang K 2006 *Phys. Rev. B* **74** 193314
- [50] Duan C G, Velev J P, Sabirianov R F, Zhu Z, Chu J, Jaswal S S, Tsymbal E Y 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 137201
- [51] Mirhosseini H, Maznichenko I V, Abdelouahed S, Osttanin S, Ernst A, Mertig I, Henk J 2010 *Phys. Rev. B* **81** 073406
- [52] Abdelouahed S, Henk J 2010 *Phys. Rev. B* **82** 193411
- [53] Andreev T, Barke I, Hövel H 2004 *Phys. Rev. B* **70** 205426
- [54] Du Y, Ding H C, Sheng L, Savrasov S Y, Wan X, Duan C G 2014 *J. Phys.: Condens. Matter* **26** 025503
- [55] Wan J Z, Hang C D, Wen Y T, Shi J G, Xian G W, Chun G D 2015 *J. Phys.: Condens. Matter* **27** 076003
- [56] Anisimov V I, Zaanen J, Andersen O K 1991 *Phys. Rev. B* **44** 943
- [57] Rotenberg E, Chung J W, Kevan S D 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 4066
- [58] Dedkov Y S, Fonin M, Rüdiger U, Laubschat C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 107602
- [59] Vajna S, Simon E, Szilva A, Palotas K, Ujfalussy B, Szunyogh L 2012 *Phys. Rev. B* **85** 075404
- [60] Bian G, Wang X, Miller T, Chiang T C 2013 *Phys. Rev. B* **88** 085427
- [61] Ast C R, Henk J, Ernst A, Moreschini L, Falub M C, Pacilé D, Bruno P, Kern K, Grioni M 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 186807
- [62] Nitta J, Akazaki T, Takayanagi H, Enoki T 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1335
- [63] Cercellier H, Didiot C, Fagot-Revurat Y, Kierren B, Moreau L, Malterre D, Reinert F 2006 *Phys. Rev. B* **73** 195413
- [64] Popović D, Reinert F, Hüfner S, Grigoryan V G, Springborg M, Cercellier H, Fagot-Revurat Y, Kierren B, Malterre D 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045419

SPECIAL ISSUE—Recent developments and applications of computational physics

Recent progress in Rashba spin orbit coupling on metal surface*

Gong Shi-Jing Duan Chun-Gang[†]

(Key Laboratory of Polar Materials and Devices, Ministry of Education, School of Information Science Technology, East China Normal University, Shanghai 200241, China)

(Received 19 May 2015; revised manuscript received 6 July 2015)

Abstract

Spin-orbit coupling (SOC) is a bridge between the spin and orbital of an electron. Through SOC, spin of the electron can possibly be controlled through external electric fields. It is found that many novel physical phenomena in solids are related with SOC, for example, the magnetic anisotropy of magnetic materials, the spin Hall effect, and the topological insulator, etc. In the surface of solid or at the interface of heterostructure, Rashba SOC is induced by the structure inversion asymmetry. It was observed first in semiconductor heterostructure, which has an inversion asymmetric potential at the interface. Because Rashba SOC at the interface can be easily controlled through gate voltage, it is of great significance in the field of electric control of magnetism. Metal surface subsequent to semiconductor becomes another main stream with large Rashba SOC. In this paper, we review the recent progress in Rashba SOC in metal surfaces, including both the magnetic and nonmagnetic metal surfaces. We demonstrate the findings in Au(111), Bi(111), Gd(0001), etc., and discuss the possible factors that could influence Rashba SOC, including the surface potential gradient, atom number, the symmetry of the surface wavefunction, and the hybridization between the different orbitals in the surface states, etc. We also discuss the manipulation of Rashba SOC through electric field or surface decoration. In addition, on magnetic surface, there coexist Rashba SOC and magnetic exchange interaction, which provides the possibility of controlling magnetic properties by electric field through Rashba SOC. The angle-resolved photoemission spectroscopy and the first-principles calculations based on density functional theory are the two main methods to investigate the Rashba SOC. We review the results obtained by these two approaches and provide a thorough understanding of the Rashba SOC in metal surface.

Keywords: Rashba, spin orbit coupling, metal surface, angle-resolved photoemission spectroscopy

PACS: 71.70.Ej, 73.20.At, 79.60.Bm, 72.25.-b

DOI: [10.7498/aps.64.187103](https://doi.org/10.7498/aps.64.187103)

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant Nos. 2014CB921104, 2013CB922301), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61125403), the Natural Science Foundation of Shanghai, China (Grant No. 14ZR1412700), and the Program of Academic Leaders of Shanghai, China.

[†] Corresponding author. E-mail: cgduan@clpm.ecnu.edu.cn