L'Hamiltonià de wurtzita en termes d'invariants

Josep Planelles

14 de gener de 2016

L'Hamiltonià WZ en terme d'invariants és:[1, 2, 3, 4]

$$
\begin{aligned}
\mathbb{H}_{WZ} &= \Delta_1 \mathbb{L}_z^2 + \Delta_2 \mathbb{L}_z \sigma_z + \Delta(\mathbb{L}_+ \sigma_- + \mathbb{L}_- \sigma_+) \\
&+ \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[(A_1 + A_3 \mathbb{L}_z^2) k_z^2 + (A_2 + A_4 \mathbb{L}_z^2)(k_x^2 + k_y^2) \right. \\
&- \left. A_5 (\mathbb{L}_+^2 k_-^2 + \mathbb{L}_-^2 k_+^2) - 2A_6 k_z (\{\mathbb{L}_z, \mathbb{L}_+\} k_- + \{\mathbb{L}_z, \mathbb{L}_-\} k_+) \right]
\end{aligned} \tag{1}
$$

En aquesta equació els esmentats autors[3, 4] utilitzen les definicions $L_\pm = (Lx \pm i\, L_y)/\sqrt{2}$, $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$, $2\{\mathbb{L}_z, \mathbb{L}_\pm\} = \mathbb{L}_z \mathbb{L}_\pm + \mathbb{L}_\pm \mathbb{L}_z$ i $k_\pm = kx \pm i k_y$.

En la base WZ,

$$
\begin{array}{lclcl}
|u_1(3/2)\rangle &=& -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle &=& Y_{11} \uparrow \\
|u_2(-1/2)\rangle &=& \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \uparrow\rangle &=& Y_{1,-1} \uparrow \\
|u_3(1/2)\rangle &=& |Z \uparrow\rangle &=& Y_{10} \uparrow \\
|u_4(-3/2)\rangle &=& \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle &=& Y_{1,-1} \downarrow \\
|u_5(1/2)\rangle &=& -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \downarrow\rangle &=& Y_{11} \downarrow \\
|u_6(-1/2)\rangle &=& |Z \downarrow\rangle &=& Y_{10} \downarrow
\end{array} \tag{2}
$$

les matrius de moment angular implicades poden ser calculades a partir de les matrius $\mathbb{L}_z, \mathbb{L}_+, \mathbb{L}_-, \sigma_z, \sigma_+, \sigma_-$, les quals, amb la definició usual, $L_\pm = L_x \pm i\, L_y$, $\sigma_\pm = \sigma_x \pm i\, \sigma_y$, resulten:[1]

$$
\mathbb{L}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad
\mathbb{L}_+ = \sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad
\mathbb{L}_- = \sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{3}
$$

$$
\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad
\sigma_+ = 2 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad
\sigma_- = 2 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{4}
$$

Per tal d'obtenir la representació matricial de l'operador WZ en la base (2) partim de (3), (4) per obtenir $\mathbb{L}_x, \mathbb{L}_y, \mathbb{L}_z$,$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. Usem aquestes components dels moments angulars que hem obtingut, més les definicions *no estàndard* $L_\pm = (Lx \pm i\, L_y)/\sqrt{2}$, $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$ i ho substituïm en (1). Òbviament, amb les fases usuals dels operadors $L_\pm$ i $\sigma_\pm$, cal modificar de manera adient l'eq. (1) per obtenir la representació

[1] Cal no oblidar que $\hat{S}_i = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_i$ i per això les matrius de creació/aniquilació $\sigma_\pm$ són les $S_\pm$ multiplicades per dos.

matricial correcta.

L'Hamiltonià WZ amb massa variable[5, 6, 7, 8] també pot ser escrit en termes d'invariants. He trobat però que la fórmula, com ja va passar per a ZB, no és la mateixa per a massa constant i variable. Usant les fases estàndard per als operador de creació/aniquilació, $L_\pm = Lx \pm i\, L_y$, $\sigma_\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y$, podem comprovar que l'Hamiltonià WZ amb massa variable en termes d'invariants resulta ser:

$$\begin{aligned}
\mathbb{H}_{WZ}^{(m_{var})} &= \Delta_1 \mathbb{L}_z^2 + \Delta_2 \mathbb{L}_z \sigma_z + \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\,\Delta(\mathbb{L}_+\sigma_- + \mathbb{L}_-\sigma_+) \\
&+ \tfrac{\hbar^2}{2m_0}\Big\{\, \mathbb{I}\, k_z A_1 k_z + \mathbb{L}_z^2\, k_z A_3 k_z + \mathbb{I}\,(k_x A_2 k_x + k_y A_2 k_y) + \mathbb{L}_z^2\,(k_x A_4 k_x + k_y A_4 k_y) \\
&- \mathbb{L}_z \Big[i\, k_y (A_5^{(+)} - A_5^{(-)}) k_x - i\, k_x (A_5^{(+)} - A_5^{(-)}) k_y \Big] \\
&- \tfrac{1}{2}\,\mathbb{L}_+^2\, k_-\, A_5\, k_- - \tfrac{1}{2}\,\mathbb{L}_-^2\, k_+\, A_5\, k_+ \\
&+ \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\,\mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_+ (k_z\, A_6^{(-)}\, k_+ + k_+\, A_6^{(+)}\, k_z) \\
&- \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\,\mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_- (k_z\, A_6^{(-)}\, k_- + k_-\, A_6^{(+)}\, k_z) \\
&- \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\,\mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_- (k_+\, A_6^{(-)}\, k_z + k_z\, A_6^{(+)}\, k_+) \\
&+ \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\,\mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_+ (k_-\, A_6^{(-)}\, k_z + k_z\, A_6^{(+)}\, k_-) \Big\}
\end{aligned} \tag{5}$$

(6)

Referències

[1] G. L. Bir and G. E. Pikus, Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors (Wiley, New York, 1974).

[2] K.Cho PRB 14 (1976)4463

[3] Chuang and Chang PRB 54 (1996) 2491

[4] Punya and Lambrecht PRB 85 (2012) 195147).

[5] F. Mireles and S. Ulloa, Phys. Rev. B 62, 2562 (2000).

[6] R. G. Veprek, S. Steiger, and B. Witzigmann, Phys. Rev. B 76, 165320 (2007).

[7] R. G. Veprek, S. Steiger and B. Witzigmann, Opt. Quant. Electron. 40, 1169 (2008).

[8] M. F. Schubert, Phys. Rev. B 81, 035303 (2010).