# Implementació del camp magnètic arbitràriament orientat en QDs:

Josep Planelles

17 de febrer de 2016

## 1 Teoria

Una partícula confinada de càrrega $q$ i massa $m_0$, en presència de camp magnètic, presenta un Hamiltonià,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^0 + \mathcal{H}^B = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}{2m_0} - \frac{q\hbar}{2m_0}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} + V \tag{1}$$

Per tant,

$$\mathcal{H}^B = \frac{q^2\,\mathbf{A}^2}{2m_0} - \frac{q\,\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}}{m_0} - \frac{q\hbar}{2m_0}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} \tag{2}$$

on hem assumit que usem el gauge de Coulomb ($\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$) i escrivim $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, $\mathbf{k} = -i\,\nabla$, per tal d'explicitar les unitats. Per a forats $q = |e|$.

Un camp magnètic arbitrari $\mathbf{B} = (B_x^0, B_y^0, B_z^0) = B_0(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ pot ser generat pel potencial vector $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(zB_y^0 - yB_z^0, xB_z^0 - zB_x^0, yB_x^0 - xB_y^0)$, per al qual és immediat comprovar que $\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$.

Calculem

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^2 \quad &= \quad \tfrac{B_0^2}{4}\left[x^2\,(\cos^2\theta + \sin^2\theta\sin^2\phi) + y^2\,(\cos^2\theta + \sin^2\theta\cos^2\phi) + z^2\,\sin^2\theta\right.\\
&\quad \left. -zy\,\sin 2\theta\,\sin\phi - zx\,\sin 2\theta\,\cos\phi - xy\sin^2\theta\sin 2\phi\right] \qquad (3)\\
2\,\hbar\,\mathbf{A}\cdot\mathbf{k} \quad &= \quad B_x^0\hat{L}_x + B_y^0\hat{L}_y + B_z^0\hat{L}_z = \mathbf{B}\cdot\widehat{\mathbf{L}}
\end{aligned}$$

Calculem ara els termes $\langle u_j|\mathcal{H}^B|u_i\rangle|f_i\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle u_j|\tfrac{q^2A^2}{4m_0}\,(|u_i\rangle|f_i\rangle) \quad &= \quad |f_i\rangle\langle u_j|\tfrac{q^2A^2}{4m_0}|u_i\rangle = \delta_{ij}\,\tfrac{q^2A^2}{4m_0}|f_i\rangle\\
\langle u_j|\tfrac{q\hbar}{m_0}\,\mathbf{A}\cdot\mathbf{k}\,(|u_i\rangle|f_i\rangle) \quad &= \quad |f_i\rangle\langle u_j|\tfrac{q}{2m_0}\,\mathbf{B}\cdot\widehat{\mathbf{L}}\,|u_i\rangle + \delta_{ij}\,\tfrac{q}{2m_0}\mathbf{B}\cdot\widehat{\mathbf{L}}\,|f_i\rangle \qquad (4)\\
\langle u_j|\tfrac{q\hbar}{m_0}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}\,(|u_i\rangle|f_i\rangle) \quad &= \quad |f_i\rangle\,\tfrac{q\hbar}{2m_0}\,\langle u_j|\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}|u_i\rangle
\end{aligned}$$

Per tant, la matriu que actua sobre les components $|f_i\rangle$ de la envolupant és, amb $\mu_B = \frac{q\hbar}{2m_0}$,

$$\mathbb{H}^B = \frac{q^2A^2}{2m_0}\,\mathbb{I} - \mu_B\,\mathbf{B}\cdot(\frac{\mathbb{L}}{\hbar} + \sigma) - \mathbb{I}\,\sum_i^{x,y,z}\frac{q\,B_i}{2m_0}\,\hat{L}_i \tag{5}$$

L'acció de les bandes remotes queda incorporada pel canvi de la massa lliure $m_0$ per la massa efectiva. Aquesta influència de les bades remotes a través de canvis en la massa sembla ser rebutjable en el terme Zeeman.[1, 2] Seguint aquest mateix criteri, únicament modifiquem l'eq. (5) amb les assignacions següents:

$$\begin{aligned} &\tfrac{A^2}{m_0} && \rightarrow \quad \tfrac{A_x^2+A_y^2}{m_\perp} + \tfrac{A_z^2}{m_z} \\ &\tfrac{A_i k_i}{m_0} = \tfrac{B_i \hat{L}_i}{2m_0} && \rightarrow \quad \tfrac{A_i\, k_i}{m_i} \end{aligned} \tag{6}$$

Cal tenir en compte que cal canviar el signe del dos termes, atès que el signe de la massa de forats és negativa. Ara be, el coeficients $A_i$ inclouen el signe, per tant, en principi, cal no canviar res. Però cal tenir en compte també que, d'acord amb el model de JPCM,[2] cal que amb el model d'una banda (o de bandes no interaccionats) electrons i forats siguen imatges especulars. Per tant, en incloure multiplicant els coeficients $A_i$ en el primer i tercer terme – i no afectant el terme on apareix $\mu_B$ –, els tres termes han de tenir signe positiu:

$$\mathbb{H}_{ij}^B = \delta_{ij} \left[ \frac{q^2(A_x^2 + A_y^2)}{2m_\perp^{(i)}} + \frac{q^2 A_z^2}{2m_z^{(i)}} + \sum_i^{x,y,z} \frac{q\, A_i}{m_i}\, \hat{p}_i \right] + \mu_B\, \mathbf{B} \cdot (\frac{\mathbb{L}_{ij}}{\hbar} + \sigma_{ij}) \tag{7}$$

on $q$ és el mòdul de la càrrega de l'electró i, e.g., $m_\perp^{(1)} = m_0/(A_2 + A_4)$.

Finalment, si considerem que el sistema està compost per regions amb diferent massa efectiva, caldrà tenir en compte que mentre que dins de cada regió la massa és constant i per tant a efectes d'integració en la cel·la unitat de les funcions de Bloch tot és com si la massa fos constant, aquesta no ho és per a l'envolupant. Per tant, $q\, \frac{A_i}{2m_i}\, \hat{p}_i \neq \hat{p}_i\, q\, \frac{A_i}{2m_i}$ i l'equació anterior caldrà escriure-la tenint en compte aquesta falta de commutació:

$$\mathbb{H}_{ij}^B = \delta_{ij} \left[ \frac{q^2(A_x^2 + A_y^2)}{2m_\perp^{(i)}} + \frac{q^2 A_z^2}{2m_z^{(i)}} + \sum_i^{x,y,z} \frac{q}{2}\, \frac{A_i}{m_i}\, \hat{p}_i + \frac{q}{2}\, \hat{p}_i\, \frac{A_i}{m_i} \right] + \mu_B\, \mathbf{B} \cdot (\frac{\mathbb{L}_{ij}}{\hbar} + \sigma_{ij}) \tag{8}$$

# Referències


[1] van Bree J, Silov A Y, Koenraad P M, Flatté M E and Pryor C E 2012 *Phys Rev. B* **85** 165323.

[2] J. Planelles and J.I. Climente 2013 *J. Phys.: Condens. Matt.* **25** 485801.