Implementació del camp magnètic en QDs: el cas de la valència en wurtzita

Josep Planelles

17 de febrer de 2016

1 Implementació de camp magnètic axial

Seguim la implementació de camp magnètic de Planelles and Climente[1]. Per tant, partim de l'equació 16 d'aquest paper per a forats de valència (que està escrita en a.u.):

$$\mathcal{H}_h = \mathcal{H}_h^0 + \mathcal{H}_h^B = \{ \sum_{\alpha=\perp,z} \nabla_\alpha \frac{1}{2|m_\alpha|} \nabla_\alpha \} + \{ -\frac{B_0^2 \rho^2}{8|m_\perp|} - \frac{B_0}{2|m_\perp|} (\hat{L}_z + \sigma_z) \}. \tag{1}$$

Considerem la funció d'ona $|\Psi(\mathbf{r})\rangle = \sum_i^N |J_z\rangle_i |f\rangle_i$, on $|J_z\rangle$ son les funcions de Bloch i $|f\rangle$ les envolupants. El terme clau a estudiar és:

$$\begin{aligned}
\langle J_z' | \mathcal{H}_h^B | J_z \rangle |f\rangle &= \langle J_z' | \left(-\frac{B_0^2 \rho^2}{8|m_\perp|} - \frac{B_0}{2|m_\perp|} (\hat{L}_z + \hat{\sigma}_z) \right) |J_z\rangle |f\rangle \\
&= \delta_{J_z' J_z} \left(-\frac{B_0^2 \rho^2}{8|m_\perp|} - \frac{B_0 \, (L_z + \sigma_z)}{2|m_\perp|} - \frac{B_0}{2|m_\perp|} (\hat{L}_z + \hat{\sigma}_z) \right) |f\rangle \\
&= \delta_{J_z' J_z} \left(-\frac{B_0^2 \rho^2}{8|m_\perp|} - \frac{B_0 \, (L_z + \sigma_z)}{2|m_\perp|} - \frac{B_0}{2|m_\perp|} \hat{L}_z \right) |f\rangle
\end{aligned} \tag{2}$$

En aquest punt, com fèiem en [1], seguim Bree[2] que evidenciava (en el cas de QDs de ZnBl) que la influència de les bades remotes en el terme Zeeman, a través de canvis en la massa efectiva, és rebutjable. Nosaltres en [1] assumim açò mateix i que tampoc la banda de conducció aportava canvis en la massa, hipòtesi validada per comparació amb l'experiment. Ara estenem aquesta hipòtesi a QDs amb estructura de WZ, de manera que, de manera semblant a ZnBl, $\langle J_z' | \mathcal{H}_h^B | J_z \rangle |f\rangle$ és simplement:

$$\langle J_z' | \mathcal{H}_h^B | J_z \rangle |f\rangle = \delta_{J_z' J_z} \left(-\frac{B_0^2 \rho^2}{8|m_\perp|} - \mu_B \, B_0 \, (L_z + \sigma_z) - \frac{B_0}{2|m_\perp|} \hat{L}_z \right) |f\rangle \tag{3}$$

on $\mu_B = |e|/2m$ és el magnetó de Bohr (si no hi ha efecte de les bandes en la massa, aquesta és la isòtropa massa lliure).

En la resta de termes, les bandes remotes contribueixen a les masses. En el cas de les bandes A i B aquesta massa efectiva és la inversa de $(A_2 + A_4)$ mentre que en la banda C és la inversa del paràmetre màssic A_2. Amb tot açò els termes magnètics que entren en els elements diagonals de l'hamiltonià de WZ resulten (atenció al signe!)[1]:

[1]Vegeu detalls a l'apèndix 1. També allí donem alguns detalls sobre la implementació en COMSOL on hi ha únicament termes diagonals dels coeficients a i β.

$$
\begin{aligned}
\Delta H_{11} &= \tfrac{B_0^2\rho^2}{8}\,(A_2+A_4) + (L_z^{(u_1)}+\sigma_z^{(u_1)})\,\mu_B\,B_0 + \tfrac{B_0}{2}\,(A_2+A_4)\,\hat{L}_z \\
\Delta H_{22} &= \tfrac{B_0^2\rho^2}{8}\,(A_2+A_4) + (L_z^{(u_2)}+\sigma_z^{(u_2)})\,\mu_B\,B_0 + \tfrac{B_0}{2}\,(A_2+A_4)\,\hat{L}_z \\
\Delta H_{33} &= \tfrac{B_0^2\rho^2}{8}\,A_2 + (L_z^{(u_3)}+\sigma_z^{(u_3)})\,\mu_B\,B_0 + \tfrac{B_0}{2}\,A_2\,\hat{L}_z \\
\textit{etc.} & \quad ....
\end{aligned}
\tag{4}
$$

2 Implementació de camp magnètic no axial

2.1 Les rotacions relatives

Considerar camp magnètic no axial en l'hamiltonià $\mathcal{H}_h = \mathcal{T}_h^0 + \mathcal{V}_h^0 + \mathcal{H}_h^B = \mathcal{H}_h^0 + \mathcal{H}_h^B$ pot ser contemplat com una rotació del camp magnètic respecte d'uns eixos soldats a l'estructura cristal·lina o podem considerar que tot roman fixe (el propi camp magnètic, les funcions de base de Bloch, etc.) excepte l'estructura cristal·lina i la forma del potencial (si el potencial és de simetria esfèrica aquest és invariant sota rotacions i no caldria fer aquesta precisió). El quit de la qüestió és l'angle entre l'eix c de l'estructura cristal·lina (a la que va soldat el potencial) i el camp extern.[2]

Hi ha doncs dues alternatives: considerar camp axial i funcions de base fixes i efectuar una rotació de l'eix c de l'estructura cristal·lina i del terme potencial o partir d'un camp $\mathbf{B} = B_0\,(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ que pot derivar d'un potencial vector $\mathbf{A} = B_0\,(-y\cos\theta/2 + z\,\sin\theta\sin\phi, x\cos\theta/2 - z\,\sin\theta\cos\phi, 0)$ i derivar, des del principi, l'hamiltonià que resulta en projectar sobre la base de valència, seguint passos similars als de la referencia [1].

Aquesta segona opció permet aplegar a la mateixa eq. (12) de [1] i, si rebutgem la derivació de la massa $[\frac{\partial}{\partial\rho}(\frac{1}{m_\perp}) \approx 0]$, a l'equació (13a):

$$
\mathcal{T}_\perp = p_\perp \frac{1}{2m_\perp} p_\perp + \frac{q^2}{2m_\perp}\,A_\perp^2 - \frac{q}{m_\perp}\,A_\perp \cdot p_\perp \tag{5}
$$

Però a partir d'aquest punt, en substituir el potencial vector pel seu valor, les equacions se compliquen i requereixen ser investigades amb més detall, més endavant. Ara tornem sobre l'altra possibilitat: fixar els eixos al camp magnètic i a les funcions de base i rotar l'estructura cristal·lina en el terme cinètic així com rotar també respecte aquest eix fix el terme potencial. Respecte del terme cinètic, i també al potencial, aquesta rotació activa és just la inversa de la rotació passiva (en que canvien els eixos i el sistema roman quiet). Per tant caldrà efectuar la transformació $\mathbb{R}\mathbb{H}_h^0\mathbb{R}^{-1}$. Veurem desprès com efectuar-ho de manera senzilla una volta $\mathbb{H}^0$ està expressat en termes de productes de matrius per moments (de manera semblant a la teoria d'invariants que Luttinger aplicà a l'Hamiltonià de ZnBl). Hi a també el terme magnètic. Aquest terme deriva de representar en la base (fixa, que no rota) l'operador següent (que actua sobre la envolupant):

$$
\mathcal{H}^{(B)} = -\frac{B_0^2\rho^2}{8|m_\perp|} - \mu_B\,(L_z + \sigma_z)\,B_0 - \frac{B_0}{2|m_\perp|}\hat{L}_z \tag{6}
$$

Cert és que els eixos estan fixos, la base doncs també, així com el camp. Però rotem l'estructura cristal·lina. Per tant, la rotació afecta únicament la massa efectiva.[3] Per tant, desprès de la rotació del QD vs. el camp trobaríem la següent matriu Hamiltoniana:

[2] Tot i ser obvi, cal notar que es tracta d'una rotació interna, d'una part de l'Hamiltonià respecte d'un altra. És clar que si tot rota, $\mathbb{R}^{-1}\mathbb{H}_h\mathbb{R}$, res no canvia.

[3] Si el sistema fos de simetria axial, aleshores, en actuar $\hat{L}_z$ sobre l'envolupant donaria lloc a aquesta multiplicada per M_z i el comportament del tercer terme de l'equació (6) seria com el del primer terme.

$$\mathbb{H}' = \mathbb{R}(\mathbb{T}+\mathbb{V})\mathbb{R}^{-1} + \mathbb{H}_B(m'_\perp) \tag{7}$$

on $m'_\perp$ representa el factor màssic de les segones derivades en x (o en y) de corresponent terme diagonal[4]. Cal adonar-se que si $B_0 = 0$ la rotació no te cap efecte sobre el resultat de la diagonalització (resolució de l'equació d'autovalors de l'envolupant). A l'hora de calcular la rotació del terme $\mathbb{T}+\mathbb{V}$ és convenient –no necessari– expressar aquest terme en funció de productes matrius per operadors de moment (com en la teoria d'invariants de Luttinger per a l'Hamiltonià de ZnBl). Açò ho tractem a la subsecció 2.4.

2.2 L'error en el raonament de la subsecció anterior

L'eq. (1) és el punt de partida per al raonament de la subsecció anterior i està escrita en termes de l'operador $\hat{L}_z$. L'aparició de l'operador $\hat{L}_z$ s'origina a partir del terme $(\mathbf{p}-q\mathbf{A})^2 = p^2 + q^2 A^2 - 2\,q\,\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$, en considerar un camp magnètic uniform axial descrit pel potencial vector $\mathbf{A} = \frac{B_0}{2}\,(-y, x, 0)$ que fa que: $\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} = \frac{B_0}{2}\,(xp_y - yp_x) = \frac{B_0}{2}\,L_z$.

Aleshores, escrivim l'Hamiltonià total $\mathcal{H}$ com la suma de l'Hamiltonià a camp magnètic zero $\mathcal{H}_0$ més tres termes addicionals que contenen el camp magnètic i que se fan zero si aquest camp val zero. En aquests termes és on també apareix L_z. La suma d'aquests termes és allò que anomenem Hamiltonià magnètic $\mathcal{H}_B$.

En la subsecció anterior es planteja l'obtenció de l'Hamiltonià en presència d'un camp magnètic no axial a partir de la rotació de l'Hamiltonià $\mathcal{H}_0$, $\mathcal{R}\mathcal{H}_0\mathcal{R}^{-1}$, mantenint $\mathcal{H}_B$ invariant.Tanmateix, més endavant en les apunts es plantejarà la transformació equivalent en que mantenim fix $\mathcal{H}_0$ i rotem l'Hamiltonià magnètic en sentit contrari, $\mathcal{R}^{-1}\mathcal{H}_B\mathcal{R}$.

Qualsevol de les dues propostes equivalents conté un error implícit. Mantenir fix $\mathcal{H}_0$ vol dir mantenir fix (p_x, p_y, p_z). Per tant, la rotació del camp magnètic respecte de l'estructura cristal·lina significa la rotació del potencial vector, $\mathbf{A}$,[5] respecte del moment lineal $\mathbf{p}$.

La pregunta que cal fer doncs és si partir de $\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$, fixar $\mathbf{p}$ i rotar $\mathbf{A}$ generant $\mathbf{A}'$ (o fixar $\mathbf{A}$ i rotar $\mathbf{p}$ generant $\mathbf{p}'$) dóna lloc a que el producte $\mathbf{A}'\cdot\mathbf{p} = L'_z$, és a dir, a l'$L_z$ rotat. La resposta és que no i mostrarem un contraexemple senzill. Escrivim:

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} = (-y, x, 0)\cdot\begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = -y\,p_x + x\,p_y = L_z$$

Considerem una rotació d'angle θ al voltant de l'eix z. Aquesta rotació deixa L_z invariant, i.e., $L'_z = L_z$. Però canvia $\mathbf{A}$ en $\mathbf{A}' = (-y\cos\theta + x\sin\theta, -y\sin\theta + x\cos\theta, 0)$ i el producte $\mathbf{A}'\cdot\mathbf{p}$ que resulta igual a $\cos\theta\,_z + (xp_x - yp_y)\,\sin\theta$ no és igual a L_z.

[4]**Important**: Fixem la rotació amb angles θ i ϕ que forma el camp magnètic (que defineix l'eix z) amb l'eix c de l'estructura cristal·lina. És clar que si $\theta = 0$ i fem que ϕ tinga un valor arbitrari, aleshores físicament res no canvia (rotem energia cinètica i potencial al voltant de l'eix c). Per tant, físicament el valor de l'angle ϕ és irrellevant. Ara bé, una rotació $\theta \neq 0$ en que fixem $\phi = \pi/4$ (de màxima simetria) i la mateixa rotació per a un altre valor de ϕ (de menor simetria) donen elements de matriu de l'Hamiltonià diferents. Fins i tot els coeficients màssics en x i y poden ser diferents entre si, amb la conseqüent complicació en l'assignació de les masses en el terme magnètic. Per tot açò, atès que únicament és rellevant l'angle θ entre els eixos c i z, en la implementació fixarem sempre $\phi = \pi/4$ (de màxima simetria) per a qualsevol valor de θ.

[5]Cal anar en compte a l'hora de definir $\mathbf{A}(\theta,\phi)$ que genera el camp $\mathbf{B}(\theta,\phi)$ per a qualsevol valors de θ i ϕ. Per exemple, el potencial $\mathbf{A} = (-y, x, 0)$ general un camp $\mathbf{B} = (0, 0, 2)$, però la rotació $\mathcal{R}$ que porta $\mathbf{A}$ a $\mathbf{A}' = \mathcal{R}\mathbf{A}$ també hauria de portar $\mathbf{B}$ a $\mathbf{B}' = \mathcal{R}\mathbf{B}$. Però podem comprovar que $\nabla\mathbf{A}' \neq \mathbf{B}'$. Tanmateix, si generem el camp $\mathbf{B} = (\cos\phi, \sin\phi, 0)$ des del potencial vector $\mathbf{A} = (z\sin\phi, -z\cos\phi, 0)$, trobem que per a qualsevol angle $\nabla\mathbf{A}' = \mathbf{B}'$.

2.3 El camí a seguir

La solució al problema consisteix a tornar sobre la subsecció 2.1 però fer ús del potencial vector $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(zB_y^0 - yB_z^0, xB_z^0 - zB_x^0, yB_x^0 - xB_y^0)$, on $B_x^0 = B_0 \sin\theta\cos\phi$, $B_y^0 = B_0 \sin\theta \sin\phi$ i $B_z^0 = B_0\cos\theta$, en lloc del potencial vector allí proposat que complica innecessàriament l'àlgebra.[6] El detalls venen recollits en el apunts *Implementació del camp magnètic arbitràriament orientat en QDs* de 17 de febrer de 2016.

2.4 Hamiltonià WZ amb massa variable en termes de productes matriu-operadors

Vam determinar en el seu dia que l'hamiltonià WZ amb massa constant,

$$\begin{bmatrix} F & -K^* & -H^* & 0 & 0 & 0 \\ -K & G & H & 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 \\ -H & H^* & \lambda & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F & -K & H \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & -K^* & G & -H^* \\ 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & 0 & H^* & -H & \lambda \end{bmatrix} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} F &= \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta \\ G &= \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta \\ \lambda &= \frac{\hbar^2}{2m_e}[A_1k_z^2 + A_2k_\perp^2] \\ \theta &= \frac{\hbar^2}{2m_e}[A_3k_z^2 + A_4k_\perp^2] \\ K &= \frac{\hbar^2}{2m_e}A_5k_+^2 \\ H &= \frac{\hbar^2}{2m_e}A_6k_+k_z \end{aligned} \tag{9}$$

podia ser escrit en termes d'invariants segons l'equació:

$$\begin{aligned} \mathbb{H}_{WZ} &= \Delta_1\mathbb{L}_z^2 + \Delta_2\mathbb{L}_z\sigma_z + \Delta(\mathbb{L}_+\sigma_- + \mathbb{L}_-\sigma_+) \\ &+ \tfrac{\hbar^2}{2m_0}\left[(A_1 + A_3\mathbb{L}_z^2)k_z^2 + (A_2 + A_4\mathbb{L}_z^2)(k_x^2 + k_y^2)\right. \\ &- \left. A_5(\mathbb{L}_+^2k_-^2 + \mathbb{L}_-^2k_+^2) - 2A_6k_z(\{\mathbb{L}_z,\mathbb{L}_+\}k_- + \{\mathbb{L}_z,\mathbb{L}_-\}k_+)\right] \end{aligned} \tag{10}$$

L'hamiltonià WZ amb massa variable és:

$$\begin{bmatrix} F-\rho & \kappa & \xi^* & 0 & 0 & 0 \\ \kappa^* & G+\rho & -\xi & 0 & 0 & \Delta \\ \eta & -\eta^* & \lambda & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F+\rho & \kappa^* & -\xi \\ 0 & 0 & \Delta & \kappa & G-\rho & \xi^* \\ 0 & \Delta & 0 & -\eta^* & \eta & \lambda \end{bmatrix} \tag{11}$$

[6] Per aplegar a proposar aquest potencial vector m'he adonat prèviament que mentre que $\frac{B_z^0}{2}(-y,x,0)$ genera B_z^0 en la direcció z, de la mateixa manera $\frac{B_x^0}{2}(0,-z,y)$ genera B_x^0 en la direcció x i $\frac{B_y^0}{2}(z,0,-x)$ genera B_y^0 en la direcció y. Únicament restava sumar.

$$
\begin{aligned}
F &= \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta && (12)\\
G &= \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta && (13)\\
\lambda &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,[k_z A_1 k_z + k_x A_2 k_x + k_y A_2 k_y] && (14)\\
\theta &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,[k_z A_3 k_z + k_x A_4 k_x + k_y A_4 k_y] && (15)\\
\kappa &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,[-k_x A_5 k_x + k_y A_5 k_y + i\,(k_x A_5 k_y + k_y A_5 k_x)] && (16)\\
\eta &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\left[-k_z A_6^{(+)} k_+ - k_+ A_6^{(-)} k_z\right] && (17)\\
\xi &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\left[-k_z A_6^{(-)} k_+ - k_+ A_6^{(+)} k_z\right] && (18)\\
\rho &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\left[i\,k_y\,(A_5^{(+)} - A_5^{(-)})k_x - i\,k_x\,(A_5^{(+)} - A_5^{(-)})k_y\right] && (19)\\
\Delta &= \sqrt{2}\,\Delta_3 && (20)
\end{aligned}
$$

amb $A_5 = A_5^{(+)} + A_5^{(-)}$ i $A_6 = A_6^{(+)} + A_6^{(-)}$.

En aquest cas hi ha la dificultat en els termes que contenen els paràmetres $A_6^{(\pm)}$ de trobar una matriu de moment angular, o les seues potències o productes que siguen zero en tots els elements, excepte dos d'ells. No trobem doncs les matrius "invariants". Aleshores, definim les quatre matrius $\mathbb{M}^{(i)},\ i = 1, 2, 3, 4$ de manera que:

$\mathbb{M}_{ij}^{(1)} = 0$ excepte $\mathbb{M}_{23}^{(1)} = \mathbb{M}_{46}^{(1)} = 1$
$\mathbb{M}_{ij}^{(2)} = 0$ excepte $\mathbb{M}_{13}^{(2)} = \mathbb{M}_{56}^{(2)} = 1$
$\mathbb{M}_{ij}^{(3)} = 0$ excepte $\mathbb{M}_{31}^{(3)} = \mathbb{M}_{65}^{(3)} = 1$
$\mathbb{M}_{ij}^{(4)} = 0$ excepte $\mathbb{M}_{32}^{(4)} = \mathbb{M}_{64}^{(4)} = 1$

Des del punt de vista de la simetria els productes que hi ha, en particular, en η i ξ són commutatius, malgrat la massa variable. Aleshores, atès que:

$$
\mathbb{R}^{-1}\left[\mathbb{M}^{(1)}(-\xi) + \mathbb{M}^{(3)}\,\eta\right]\mathbb{R} = \mathbb{R}^{-1}\mathbb{M}^{(1)}(-\xi)\mathbb{R} + \mathbb{R}^{-1}\mathbb{M}^{(3)}\,\eta\mathbb{R}, \tag{21}
$$

no hi ha problemes de simetria en usar aquestes matrius en lloc de matrius de moment angular i podem expressar $\mathbb{H}_{WZ}$ amb massa variable en la forma:

$$
\begin{aligned}
\mathbb{H}_{WZ}^{(m_{var})} &= \Delta_1 \mathbb{L}_z^2 + \Delta_2 \mathbb{L}_z \sigma_z + \Delta(\mathbb{L}_+\sigma_- + \mathbb{L}_-\sigma_+) \\
&+ \frac{\hbar^2}{2m_0} \Big\{ \mathbb{I}\, k_z A_1 k_z + \mathbb{L}_z^2\, k_z A_3 k_z + \mathbb{I}\,(k_x A_2 k_x + k_y A_2 k_y) + \mathbb{L}_z^2\,(k_x A_4 k_x + k_y A_4 k_y) \\
&- \mathbb{L}_z \left[i\, k_y (A_5^{(+)} - A_5^{(-)}) k_x - i\, k_x (A_5^{(+)} - A_5^{(-)}) k_y \right] \\
&- \mathbb{L}_+^2\, k_-\, A_5\, k_- - \mathbb{L}_-^2\, k_+\, A_5\, k_+ \\
&+ \mathbb{M}^{(1)} (k_z\, A_6^{(-)}\, k_+ + k_+\, A_6^{(+)}\, k_z) \\
&- \mathbb{M}^{(2)} (k_z\, A_6^{(-)}\, k_- + k_-\, A_6^{(+)}\, k_z) \\
&- \mathbb{M}^{(3)} (k_+\, A_6^{(-)}\, k_z + k_z\, A_6^{(+)}\, k_+) \\
&+ \mathbb{M}^{(4)} (k_-\, A_6^{(-)}\, k_z + k_z\, A_6^{(+)}\, k_-) \Big\}
\end{aligned} \tag{22}
$$

La utilització de les matrius $\mathbb{M}^{(i)}$ no permet però identificar les tres components d'un vector que efectuen la seua rotació amb una matriu 3×3 i no ens estalvien tenir que trobar la matriu 6×6 que efectua la rotació de la matriu completa. Per tant, l'eq. (22) és de poca utilitat a no ser que puguem escriure les matrius $\mathbb{M}^{(i)}$ en termes de les components del moment angular i els seus productes.

Hom però pot comprovar que en la base WZ,

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

resulta que:[7]

$$\mathbb{M}^{(1)} = \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_+ \tag{23}$$
$$\mathbb{M}^{(2)} = \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_- \tag{24}$$
$$\mathbb{M}^{(3)} = \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_- \tag{25}$$
$$\mathbb{M}^{(4)} = \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_+ \tag{26}$$

per tant tenim una via simple d'efectuar la rotació que, a més, podem compararla amb la de la rotació directa de l'Hamiltonià amb una matriu 6×6 (com férem en el cas de la ZnBl, per a comprovar que no hi havia errors).

La rotació de la matriu 6×6 implica tres etapes (veure apunts ”Hamiltonià de valència amb massa variable” de Juliol 18, 2014). En un a primera passem de la base de Bloch usada per a la WZ a la base $\{X\uparrow, Y\uparrow, Z\uparrow, X\downarrow, Y\downarrow, Z\downarrow\}$ mitjançant la matriu $\mathbb{S}$:

$$\mathbb{S}^t\, \mathbb{H}_{WZ}\, \mathbb{S}^* \tag{27}$$

[7] Atenció, en aquests apunts, com en la secció 1.2 *Hamiltonià wurtzita* de la *Recuperació i afegits a TG Sec. 12.X: Teoria d'invariants: model k·p* usem la definició de $L_\pm = (Lx \pm i\, L_y)/\sqrt{2}$, $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$, $2\{\mathbb{L}_z, \mathbb{L}_\pm\} = \mathbb{L}_z\mathbb{L}_\pm + \mathbb{L}_\pm\mathbb{L}_z$ i $k_\pm = kx \pm ik_y$. Amb la definició usual $L_\pm = Lx \pm i\, L_y$ cal afegir un factor $\frac{1}{2\sqrt{2}}$ davant del triple producte d'operadors d'escalonament $L_\pm$, un factor $\frac{1}{2}$ enfront dels quadrats, etc.

Tot seguit efectuem la rotació mitjançant la matriu de rotació $\mathbb{M}_{rot}$:

$$\mathbb{M}_{rot}^t \, \mathbb{S}^t \, \mathbb{H}_{WZ} \, \mathbb{S}^* \, (\mathbb{M}_{rot}^t)^{-1} \tag{28}$$

Finalment adaptem la base $\{X' \uparrow, Y' \uparrow, Z' \uparrow, X' \downarrow, Y' \downarrow, Z' \downarrow\}$ d'acord amb l'acoblament usat en WZ:

$$\mathbb{S}^* \, \mathbb{M}_{rot}^t \, \mathbb{S}^t \, \mathbb{H}_{WZ} \, \mathbb{S}^* \, (\mathbb{M}_{rot}^t)^{-1} \, \mathbb{S}^t \tag{29}$$

La matriu S que permet el canvi $\mathbb{U} = \mathbb{S}\mathbb{X}$ és en aquest cas (WZ):

$$\begin{pmatrix} |u_1(\frac{3}{2})\rangle \\ |u_2(-\frac{1}{2})\rangle \\ |u_3(\frac{1}{2})\rangle \\ |u_4(-\frac{3}{2})\rangle \\ |u_5(\frac{1}{2})\rangle \\ |u_6(-\frac{1}{2})\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \uparrow \\ Y \uparrow \\ Z \uparrow \\ X \downarrow \\ Y \downarrow \\ Z \downarrow \end{pmatrix} \tag{30}$$

Finalment, la matriu $\mathbb{M}_{rot} = \mathbb{M}_s \otimes \mathbb{M}_r$ és la mateixa que la que usarem per a ZnBl:

$$\mathbb{M}_{rot} = \left(\begin{array}{cccc}
\cos\phi\cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \sin\phi\cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & -\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \\
 & \cos\phi\cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \sin\phi\cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & -\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} \\[2ex]
-\sin\phi\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \cos\phi\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & 0 & \\
 & -\sin\phi\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \cos\phi\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & 0 \\[2ex]
\cos\phi\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \sin\phi\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \\
 & \cos\phi\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \sin\phi\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} \\[2ex]
-\cos\phi\cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & -\sin\phi\cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \\
 & \cos\phi\cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \sin\phi\cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & -\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} \\[2ex]
\sin\phi\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & -\cos\phi\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & 0 & \\
 & -\sin\phi\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \cos\phi\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & 0 \\[2ex]
-\cos\phi\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & -\sin\phi\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & -\cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \\
 & \cos\phi\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \sin\phi\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}
\end{array}\right) \tag{31}$$

Cal afegir per acabar que el sentit de la rotació ha de ser, com hem comentat més amunt, contrari si rotem els eixos o si rotem respecte d'uns eixos fixos.

Referències

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

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

3 Apèndix 1: Sobre el signe del terme magnètic axial i la implementació en COMSOL

En els termes magnètics, eq. (3), apareix el valor absolut de la massa, cosa rellevant per a forats que tenen masses negatives (les quals deriven dels paràmetres A_i. Per exemple, uns paràmetres $A_2 = -0.39$, $A_4 = -1.92$ generen una massa $m_\perp = (A_2 + A_4)^{-1} = -0.43$). La utilització en els programes del paràmetres A_i implica doncs introduir les masses negatives i, per tant, el terme magnètic l'haurem de canviar de signe. Per exemple:

$$\mathbb{H}_{11} \rightarrow \mathbb{H}_{11} + \frac{B_0^2\,(x^2+y^2)}{8}\,(A_2+A_4) + 2\,\mu_B B_0 + \frac{B_0}{2}\,(A_2+A_4)\,(-i\hbar)\,(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \tag{32}$$

El valor 2 és el resultat de la suma del nombres quàntics de les components z del moment angular orbital i el doble del moment d'espín ($2S_z = \sigma_z$).

En sistema MKS l'equació (32) necessita explicitar la càrrega e i la massa m_0 de l'electró:

$$\mathbb{H}_{11} \rightarrow \mathbb{H}_{11} + \frac{B_0^2\,|e|^2\,(x^2+y^2)}{8m_0}\,(A_2+A_4) + 2\,\mu_B B_0 + \frac{B_0\,|e|}{2m_0}\,(A_2+A_4)\,(-i\hbar)\,(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \tag{33}$$

L'equació COMSOL és:

$$-\lambda d_a u + \nabla(-c\nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta\,\nabla u + au = f \tag{34}$$

on, per al cas que ens ocupa, $d_a = 1$, $f = \alpha = \gamma = 0$. Els termes diagonals que no tenen derivades entren en a que és una supermatriu que en el nostre cas té la propietat que $a_{ij} = a_{ii}\delta_{ij}$. La modificació de a_{11} deguda al camp magnètic seria per exemple:

$$a_{11} \rightarrow a_{11} + \frac{B_0^2\,|e|^2}{8m_0}\,(A_2+A_4)\,(x^2+y^2) + 2\,\mu_B B_0 \tag{35}$$

i anàlogament els altres termes diagonals a_{ii}, on el pas d'un a un altre implica el canvi de massa ($A_2 + A_4$ en $a_{ii}, i = 1, 2, 4$ i 5 i A_2 en a_{33} i a_{66}) i el de ($L_z^{(u_i)} + \sigma_z^{(u_i)}$) que val 2 en a_{11} i que cal fer que tinga els valors $\{2, 0, 1, -2, 0, -1\}$ per a a_{ii}, $i = 1, 2...6$.

Cal afegir també els termes amb primeres derivades ($\beta_{ij}^{(k)} u_k$, $k = x, y, z$). La supermatriu β en el nostre cas és diagonal i té nuls els termes en z: $\beta_{ij}^{(k)} = \delta_{ij}\beta_{ii}^{(k)}$, $k = x, y$ ($\beta_{ij}^{(z)} = 0$). En altres paraules, β és diagonal i les submatriu columna són de la forma $[\beta_{ii}^{(x)}, \beta_{ii}^{(y)}, 0]$, amb,

$$\beta_{11}^{(x)} = \beta_{22}^{(x)} = \beta_{44}^{(x)} = \beta_{55}^{(x)} = \frac{i\hbar|e|B_0}{2m_0}\,(A_2+A_4)\,y \tag{36}$$

$$\beta_{11}^{(y)} = \beta_{22}^{(y)} = \beta_{44}^{(y)} = \beta_{55}^{(y)} = -\frac{i\hbar|e|B_0}{2m_0}\,(A_2+A_4)\,x \tag{37}$$

$$\beta_{33}^{(x)} = \beta_{66}^{(x)} = \frac{i\hbar|e|B_0}{2m_0}\,A_2\,y \tag{38}$$

$$\beta_{33}^{(y)} = \beta_{66}^{(y)} = -\frac{i\hbar|e|B_0}{2m_0}\,A_2\,x \tag{39}$$

4 Apèndix 2: Hamiltonià WZ amb massa variable usant definicions standard per al operadors de creació/aniquilació

En aquest apèndix usem les definicions estàndard de $L_\pm = (Lx \pm i\,L_y)$, $\sigma_\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y$, $\{\mathbb{L}_z, \mathbb{L}_\pm\} = \frac{1}{2}(\mathbb{L}_z\mathbb{L}_\pm + \mathbb{L}_\pm\mathbb{L}_z)$ i $k_\pm = kx \pm ik_y$. Amb aquestes definicions l'Hamiltonià WZ amb massa variable queda:

$$
\begin{aligned}
\mathbb{H}_{WZ}^{(m_{var})} &= \Delta_1 \mathbb{L}_z^2 + \Delta_2 \mathbb{L}_z \sigma_z + \frac{1}{2\sqrt{2}} \Delta (\mathbb{L}_+ \sigma_- + \mathbb{L}_- \sigma_+) \\
&+ \frac{\hbar^2}{2m_0} \Big\{ \mathbb{I}\, k_z A_1 k_z + \mathbb{L}_z^2\, k_z A_3 k_z + \mathbb{I}\,(k_x A_2 k_x + k_y A_2 k_y) + \mathbb{L}_z^2\,(k_x A_4 k_x + k_y A_4 k_y) \\
&- \mathbb{L}_z \left[i\, k_y (A_5^{(+)} - A_5^{(-)}) k_x - i\, k_x (A_5^{(+)} - A_5^{(-)}) k_y \right] \\
&- \frac{1}{2} \mathbb{L}_+^2\, k_-\, A_5\, k_- - \frac{1}{2} \mathbb{L}_-^2\, k_+\, A_5\, k_+ \\
&+ \frac{1}{2\sqrt{2}} \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_+ (k_z\, A_6^{(-)}\, k_+ + k_+\, A_6^{(+)}\, k_z) \\
&- \frac{1}{2\sqrt{2}} \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_- (k_z\, A_6^{(-)}\, k_- + k_-\, A_6^{(+)}\, k_z) \\
&- \frac{1}{2\sqrt{2}} \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_- (k_+\, A_6^{(-)}\, k_z + k_z\, A_6^{(+)}\, k_+) \\
&+ \frac{1}{2\sqrt{2}} \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_+ (k_-\, A_6^{(-)}\, k_z + k_z\, A_6^{(+)}\, k_-) \Big\}
\end{aligned} \tag{40}
$$

5 Apèndix 3: Algunes consideracions al voltant de la Rotació de Hamiltonià WZ

Per a efectuar la rotació de l'estructura cristal·lina respecte dels eixos hi ha dues alternatives: via invariants o efectuar la rotació sobre la matriu completa.

Via invariants: partim de l'equació (40) i substituïm les matrius ($\mathbb{L}_x$,$\mathbb{L}_y$,$\mathbb{L}_z$, σ_x,σ_y,σ_z) i operadors (k_x,k_y,k_z) per el corresponents rotats ($\mathbb{L}'_x$,$\mathbb{L}'_y$,$\mathbb{L}'_z$, σ'_x,σ'_y,σ'_z, k'_x,k'_y,k'_z). Tot seguit usem la matriu 3×3 de rotació

$$
M_r = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi & \cos\theta\sin\phi & -\sin\theta \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ \sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{41}
$$

per a escriure aquestes components en termes de les components sobre els eixos fixos, $\mathbb{L}_x$,$\mathbb{L}_y$,$\mathbb{L}_z$, σ_x,σ_y,σ_z, k_x,k_y,k_z. Finalment, fem les multiplicacions d'operadors per matrius i la suma de les matrius resultants, definint així l'Hamiltonià de l'estructura cristal·lina rotada, de manera anàloga a com fem en l' eq. (40) quan no hi ha rotació.

En la segona via partim de l'eq. (11) on substituïm els operadors (k_x,k_y,k_z) per (k'_x,k'_y,k'_z). Aleshores, amb la matriu 3×3 de rotació anterior, eq. (41), escrivim aquestes components k'_x,k'_y,k'_z en termes de les components sobre els eixos fixos (k_x,k_y,k_z). Finalment, efectuem la rotació de la matriu 6×6 $\mathbb{H}_{WZ}$ així obtinguda efectuant els productes de matrius 6×6 de rotació, com s'indica en l'eq. (29).

Hem comprovat en el fitxer Mathematica compara.nb que els dos procediments donen lloc al mateix resultat.

6 Apèndix 4: Hamiltonià WZ en direcció 0001 i rotació de la matriu que inclou el camp magnètic

En les seccions anteriors, hem escrit l'Hamiltonià com la suma d'un matriu $\mathbb{H}_h^B$ que inclou el terme magnètic més una altra matriu $\mathbb{H}_h^0$ que inclou la resta de l'Hamiltonià (energies cinètica, potencial, strain i piezoelectricitat). Aleshores hem fixat la direcció del camp sobre l'eix c (direcció 0001 de la WZ), cosa que equival a mantenir la matriu $\mathbb{H}_h^B$ i rotem la matriu $\mathbb{H}_h^0$ (en sentit contrari que rotaríem el camp magnètic). Desprès, sumem les matrius $\mathbb{H}_h^B$ i la matriu $\mathbb{H}_h^0$ rotada, $\mathbb{R}^\dagger\mathbb{H}_h^0\mathbb{R}$, i procedim a diagonalitzar, que no és més que una rotació addicional (estrictament una transformació unitària, com també la rotació prèvia ho és). La matriu diagonal final la podem escriure formalment:

$$\Lambda = \mathbb{U}^\dagger(\mathbb{R}^\dagger\mathbb{H}_h^0\mathbb{R} + \mathbb{H}_h^B)\mathbb{U} = (\mathbb{R}\mathbb{U})^\dagger\mathbb{H}_h^0\mathbb{R}\mathbb{U} + \mathbb{U}^\dagger\mathbb{H}_h^B\mathbb{U} \tag{42}$$

A l'hora de la pràctica aquest procediment té un petit inconvenient: per a rotar l'energia potencial, cal rotar la geometria que la defineix i, per tant, per a cada angle, cal recalcular el mallat. Si aquest és prou fi, el procediment funciona perfectament. Amb mallats pocs fins introduïm imprecisions derivades de mallar de forma diferent.

Podem obtenir el mateix resultat que abans però si rotem (en sentit contrari) la matriu $\mathbb{H}_h^B$, li sumem la matriu $\mathbb{H}_h^0$ i desprès diagonalitzem:

$$\Lambda = \mathbb{W}^\dagger(\mathbb{H}_h^0 + \mathbb{R}\mathbb{H}_h^B\mathbb{R}^\dagger)\mathbb{W} = \mathbb{W}^\dagger\mathbb{H}_h^0\mathbb{W} + (\mathbb{R}^\dagger\mathbb{W})^\dagger\mathbb{H}_h^B\mathbb{R}^\dagger\mathbb{W} \tag{43}$$

Per a usar aquest procediment podem escriure $\mathbb{H}_h^B$ en termes d'invariants o rotar directament amb la matriu de Chuang, eq. (31), seguint les indicacions de l'apèndix anterior: substituïm (x, y, z, k_x, k_y, k_z, L_x, L_y, $L_z \dots$) per ($x', y', z', k'_x, k'_y, k'_z, L'_x, L'_y, L'_z \dots$). Aleshores, amb la matriu de rotació 3×3, eq. (41), escrivim aquestes components *primades* en termes de les components originals. Finalment, efectuem la rotació de la matriu 6×6 obtinguda realitzant els productes de matrius 6×6 de rotació, com s'indica en l'eq. (31).

En terme d'invariants $\mathbb{H}_h^B$ resulta:

$$\mathbb{H}_h^B = \left[\frac{B_0^2\,(x^2+y^2)}{8} + \frac{B_0}{2}\,\hat{L}_z\right]\,\left[A_2\,\mathbb{I} + A_4\,\mathbb{L}_z^2\right] + \mu_B\,B_0\,(\mathbb{L}_z + \sigma_z) \tag{44}$$

Tot i la seua obvietat, tornem a recordar que si efectuem una rotació de *tot* el sistema, aleshores *res no canvia.* Tornem sobre l'Hamiltonià $H = T + V$. Únicament altera el sistema la rotació de T respecte de V (o viceversa). Alterem el sistema efectuant una rotació que converteix T en T' mentre mantenim V inalterat. Imaginem que en termes d'invariants T s'escriu $T = \sum k_i\mathbb{I}_i$. Aleshores, $T' = \sum k'_i\mathbb{I}'_i$. Abans de diagonalitzar però cal sumar-li V. Per poder fer la suma cal que tot estiga referit als mateixos eixos. Aleshores escrivim $k'_i = \sum_j R_{ij}\,k_j$ i $\mathbb{I}'_i = \sum_l R_{il}\,\mathbb{I}_l$, substituïm en T' i ja podem sumar per procedir a efectuar la posterior diagonalització.

En el cas que ens ocupa, $H = T + V + H_B$. Volem alterar el sistema efectuant una rotació que converteix H_B en H'_B mantenim fix $T + V$. Seguint el mateix procediment que abans, si en termes d'invariants H_B s'escriu $H_B = \sum x_i\mathbb{I}_i$, aleshores $H'_B = \sum x'_i\mathbb{I}'_i$. Com adés, abans de procedir a sumar escriurem $x'_i = \sum_j R_{ij}\,x_j$ i $\mathbb{I}'_i = \sum_l R_{il}\,\mathbb{I}_l$, substituirem en H'_B, li sumarem $T + V$, i ja podem procedir a diagonalitzar.

Hi ha un parell de comentaris finals. Atès que el potencial vector $\mathbf{A} = \frac{B_0}{2}(-y, x, 0)$, en el primer terme de l'eq. (44) podem substituir $\frac{B_0^2\,(x^2+y^2)}{4}$ per $|\mathbf{A}|^2$ que és el quadrat del mòdul d'un vector i per tant que no hauria de veure's afectat per la rotació. El terme $\frac{B_0}{2}\,\hat{L}_z$ és el resultat del producte escalar $\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$. Si els dos vectors roten sincrònicament el producte escalar no canvia, atès que:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{A} \cdot I \cdot \mathbf{p} = \mathbf{A} \cdot R^{-1} \cdot R \cdot \mathbf{p} = \mathbf{A}' \cdot \mathbf{p}' \tag{45}$$

Però si un rota respecte de l'altre si que ho canvia. Finalment hi ha el terme $B_0 \left(\mathbb{L}_z + \sigma_z\right)$ resultat del producte escalar $\mathbf{B} \cdot (\mathbb{L} + \sigma)$, que admet la mateixa consideració.

Encara que apliquem la rotació $|\mathbf{A}|^2$ no canvia, cosa que significa que $x^2 + y^2 = x'^2 + y'^2 + z'^2$.[8]

7 Apèndix 5: Rotació de la matriu vs. rotació dels índexs

Exemplificarem la idea amb el tensor d'inèrcia.

$$\mathbb{I}(x, y, z) = \begin{pmatrix} y^2 + z^2 & -xy & -xz \\ -xy & x^2 + z^2 & -yz \\ -xz & -yz & x^2 + y^2 \end{pmatrix} \tag{46}$$

amb la matriu de rotació M_r, eq. (41). Definim

$$\begin{array}{rcl} x' & = & M_r(1,1)\, x + M_r(1,2)\, y + M_r(1,3)\, z \\ y' & = & M_r(2,1)\, x + M_r(2,2)\, y + M_r(2,3)\, z \\ z' & = & M_r(3,1)\, x + M_r(3,2)\, y + M_r(3,3)\, z \end{array} \tag{47}$$

i ara substituïm aquestes equacions en $\mathbb{I}_{rot}(x, y, z) = \mathbb{I}(x', y', z')$, cosa que ens dona el tensor rodat en termes del eixos inicials.

Alternativament, podem obtenir el mateix resultat fent: $\mathbb{I}_{rot}(x, y, z) = M_r \cdot \mathbb{I}(x, y, z) \cdot M_r^{\dagger}$. Hem comprovat l'equivalència amb Mathemàtica. Però cal parar atenció a l'ordre en el producte de matrius. $M_r^{\dagger} \cdot \mathbb{I}(x, y, z) \cdot M_r$ representa la rotació inversa i òbviament dóna un resultat diferent.

Per tant, a l'hora de rotar l'strain inicial, que és una matriu 3×3 diagonal, $\epsilon^0 = Diag(a, a, c)$, farem $\epsilon^0_{rot} = M_r \cdot \epsilon^0 \cdot M_r^{\dagger}$.

8 Apèndix 6: Sobre l'equació $\mathbf{L} + \boldsymbol{\sigma} = \kappa \mathbf{J}$ en bases amb un J no definit

Ho exemplificarem en la base de (valència més split-off) de la ZnBl en que $j = 3/2$ per a la valència però $j = 1/2$ en la banda split-off.[9]

L'origen de l'equació $\mathbf{L} + \boldsymbol{\sigma} = \kappa \mathbf{J}$, on $\boldsymbol{\sigma} = 2\mathbf{S}$, prové de la física atòmica i deriva de la anòmala relació entre el moment angular d'espín i el moment magnètic associat (que és el doble que relació entre el moment angular orbital i el moment magnètic associat). Aquesta anomalia de l'espín fa que $\mathbf{J}$ i $\boldsymbol{\mu}_J$ no estiguen alineats:

$$\boldsymbol{\mu}_J = -\frac{\mu_B\, (\mathbf{L} + 2\mathbf{S})}{\hbar}; \qquad \mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \tag{48}$$

on μ_B és al magnetó de Bohr. Per tant, per poder expressar la interacció amb un camp magnètic extern en termes de $\mathbf{J}$ cal incloure un factor tensorial κ anomenat factor giromagnètic. $E = -\boldsymbol{\mu}_J \cdot \mathbf{B} = \frac{\mu_B\, \kappa}{\hbar}\, \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}$.

[8] Si apliquem la rotació eq. (41) sobre el vector $\mathbf{a} = (-y, x, 0)$ obtenim el vector $\mathbf{a}' = (-y \cos\theta \cos\phi + x \cos\theta \sin\phi, x \cos\phi + y \sin\phi, -y \cos\phi \sin\theta + x \sin\theta \sin\phi)$. És immediat comprovar que $a_x'^2 + a_y'^2 + a_z'^2 = x^2 + y^2 = a_x^2 + a_y^2 + a_z^2$. Però, atenció, $x^2 + y^2 \neq x'^2 + y'^2$.

[9] El que discutirem també aplica ala base de la WZ on j no està ben definit.

Alternativament podríem haver escrit: $E = \frac{\mu_B}{\hbar}\left(\mathbf{L}+\boldsymbol{\sigma}\right)\cdot\mathbf{B}$.

Fem intervindre ara a la base de funcions: Les matrius $\mathbb{L}_i$, σ_i i $\mathbb{J}_i$ amb $i = x, y, z$ són les representacions matricials de les components dels corresponents moments angulars. Les matrius $\mathbb{J}_i$ estan bloquejades (un bloc de 4×4 corresponent a la valència i un 2×2 a l' split-off). Si representem amb $\mathbb{KJ}_i$ la matriu que resulta de multiplicar per $\kappa = 4/3$ els elements del bloc superior de $\mathbb{J}_i$ i per $\kappa = 2/3$ el bloc inferior trobem que mentre que, com era d'esperar, la resta $(\mathbb{L}_i + \frac{1}{2}\sigma_i - \mathbb{J}_i)$ dóna lloc a una matriu 6×6 de zeros, la resta $(\mathbb{L}_i + \sigma_i - \mathbb{KJ}_i)$ dóna lloc a zeros en cadascun dels blocs, però presenta valors no nuls fora dels blocs. El motiu és que mentre que $\mathbb{KJ}_i$ presenta una estructura en blocs (perquè la presenta $\mathbb{J}_i$), la matriu resultant de la suma $\mathbb{L}_i + \sigma_i$ té valors no nuls fora dels blocs perquè en aquesta base tant $\mathbb{L}_i$ com σ_i no tenen estructura en blocs, tot i que la suma $\mathbb{L}_i + \frac{1}{2}\sigma_i = \mathbb{J}_i$ si que la té.

En resum, a l'hora d'usar representacions matricials dels operadors, és recomanable (i necessari si la base de funcions no té un J definit) considerar la interacció magnètica en termes dels moments angulars orbital i d'espín en lloc de fer ús del moment angular total:

$$E = \frac{\mu_B}{\hbar}\left(\mathbf{L}+\boldsymbol{\sigma}\right)\cdot\mathbf{B} = \frac{\mu_B}{\hbar}\left(L_z + \sigma_z\right) B_0. \tag{49}$$