Camp magnètic arbitràriament orientat en QDs: Electrons

Josep Planelles

23 de febrer de 2016

Partim, com en forats, de:

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

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 electrons $q=-|e|$ i la massa és positiva.

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

Calculem

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

Calculem ara els termes $\langle S\Sigma_j|\mathcal{H}^B|S\Sigma_i\rangle|f_i\rangle$ tenint en compte que $\langle S|\widehat{\mathbf{L}}|S\rangle=0$:

$$\begin{aligned}
\langle S\Sigma_j|\tfrac{q^2A^2}{4m_0}\,(|S\Sigma_i\rangle|f_i\rangle) \quad &= \quad |f_i\rangle\langle S\Sigma_j|\tfrac{q^2A^2}{4m_0}|S\Sigma_i\rangle=\delta_{ij}\,\tfrac{q^2A^2}{4m_0}|f_i\rangle\\
\langle S\Sigma_j|\tfrac{q\hbar}{m_0}\,\mathbf{A}\cdot\mathbf{k}\,(|S\Sigma_i\rangle|f_i\rangle) \quad &= \quad |f_i\rangle\,\cancelto{0}{\langle S\Sigma_j|\tfrac{q}{2m_0}\mathbf{B}\cdot\widehat{\mathbf{L}}\,|S\Sigma_i\rangle} \;+\delta_{ij}\,\tfrac{q}{2m_0}\mathbf{B}\cdot\widehat{\mathbf{L}}\,|f_i\rangle \qquad (3)\\
\langle S\Sigma_j|\tfrac{q\hbar}{m_0}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}\,(|S\Sigma_i\rangle|f_i\rangle) \quad &= \quad |f_i\rangle\,\tfrac{q\hbar}{2m_0}\,\langle S\Sigma_j|\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}|S\Sigma_i\rangle
\end{aligned}$$

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

$$\mathbb{H}^B = \frac{|e|^2A^2}{2m_0}\,\mathbb{I}+\mu_B\,\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}+\mathbb{I}\,\sum_i^{x,y,z}\frac{|e|\,B_i}{2m_0}\,\hat{L}_i \tag{4}$$

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, 3] Seguint aquest mateix criteri, únicament modifiquem l'eq. (4) amb les assignacions $\frac{A^2}{m_0}\to\frac{A_x^2+A_y^2}{m_\perp}+\frac{A_z^2}{m_z}$ i $\frac{A_ik_i}{m_0}=\frac{B_i\hat{L}_i}{2m_0}\to\frac{A_i\,k_i}{m_i}$. 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, $\frac{A_i}{2m_i}\,\hat{p}_i\neq\hat{p}_i\,\frac{A_i}{2m_i}$ i l'equació anterior caldrà escriure-la tenint en compte aquesta falta de commutació:

$$\mathbb{H}^B_{ij}=\delta_{ij}\left[\frac{|e|^2(A_x^2+A_y^2)}{2m_\perp^{(i)}}+\frac{|e|q^2A_z^2}{2m_z^{(i)}}+\sum_i^{x,y,z}\left(\frac{|e|}{2}\,\frac{A_i}{m_i}\,\hat{p}_i+\frac{|e|}{2}\,\hat{p}_i\,\frac{A_i}{m_i}\right)\right]+\mu_B\,\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{ij} \tag{5}$$

Referències

[1] Pryor Craig E. and Flatté Michael E. 2006 *Phys Rev. Lett.* **96** 026804.

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

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