Hamiltonià de valència amb massa variable

Josep Planelles

July 18, 2014

He anat comprovant les equacions amb mathematica i també ho ha fet Fernando, sense la inestimable ajuda del qual difícilment haguera arribat a bon port amb aquests apunts!

---

1 Hamiltonià de valència amb massa variable

Considerem en primer lloc l'Hamiltonià de Burt-Foreman sense espín (conegut com Hamiltonià de Stravinou-van Dalen.[2] Veure també Taula 12.3 en pag 310 de [1]). Però en lloc d'usar la notació A, B, C_1, C_2 de Stravinou-van Dalen usarem L, M, N, N' que permet comparar amb l'Hamiltonià de wurtzita.[3] (veure també eq. 12.205 en pag. 339 i Taula 12.2 en pag. 309 de [1]). Foreman usa una tercera notació, (F, G, H_1, H_2), veure Table 12.4, pag 314 en [1] –on hi ha inclosa l'adaptació d'espín de la base–. Uns i altres paràmetres estan relacionats, com indicarem després. Hi ha però en el llibre de Voon[1] una inconsistència de notació que pot causar molts problemes: en la pàgina 429 defineix el paràmetre $N = F - G + H_1 - H_2$ i en cap lloc defineix el paràmetre N'. No obstant això hom pot inferir el seu valor si compara l'Hamiltonià de la Taula 12.2 (pag. 309) amb l'Hamiltonià wurtzita de Mireles, [3] (veure també eq. 12.205 en pag. 339) tenint en compte que els paràmetres L_1,L_2 de wurtzita esdevenen L en Zinc Blenda, M_1,M_2,M_3 esdevenen M, N_1, N_2 esdevenen N i N_1', N_2' esdevenen N'. Tanmateix pot inferir-se que la definició de N de la pàgina 428 no pot ser correcta. Així, les relacions entre uns i altres paràmetres han de ser:

$$\begin{aligned} L = F + 2G \qquad N = F - G \\ M = H_1 + H2 \quad N' = H_1 - H_2 \end{aligned} \tag{1}$$

Doncs be, usant els paràmetres (L, M, N, N'), l'Hamiltonià de Burt-Foreman sense espín (o Hamiltonià de Stravinou-van Dalen) és:

$$\mathbb{H}_{SD} = \begin{pmatrix} k_xLk_x + k_yMk_y + k_zMk_z & k_xNk_y + k_yN'k_x & k_xNk_z + k_zN'k_x \\ k_yNk_x + k_xN'k_y & k_xMk_x + k_yLk_y + k_zMk_z & k_yNk_z + k_zN'k_y \\ k_zNk_x + k_xN'k_z & k_zNk_y + k_yN'k_z & k_xMk_x + k_yMk_y + k_zLk_z \end{pmatrix} \tag{2}$$

Si afegim l'espín en la base, $\{X\uparrow, Y\uparrow, Z\uparrow, X\downarrow, Y\downarrow, Z\downarrow\}$, l'Hamiltonià H_{SD} esdevé

$$\mathbb{H}_{SD} = \begin{pmatrix} H_{SD} & 0 \\ 0 & H_{SD} \end{pmatrix} \tag{3}$$

Procedim ara a adaptar d'espín la base,[4]

$$\begin{pmatrix} |\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle \\ |\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{i}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{i}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{i}{\sqrt{3}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{i}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X\uparrow \\ Y\uparrow \\ Z\uparrow \\ X\downarrow \\ Y\downarrow \\ Z\downarrow \end{pmatrix} \tag{4}$$

Si anomenem S a la matriu de canvi de base de l'eq. (4), podem canviar de base també la matriu (3) amb la transformació $S^*\,\mathbb{H}_{SD}\,S^t$, obtenint l'Hamiltonià adaptat d'espín.[1] Si tot seguit ens quedem amb el bloc 4×4 superior, corresponent al moment angular $J = 3/2$ obtenim:

$$H_{BF} = \begin{pmatrix} P' & S_- & -R & 0 \\ S_-^\dagger & P" & -C & -R \\ -R^\dagger & -C^\dagger & P"^* & -S_+^\dagger \\ 0 & -R^\dagger & -S_+ & P'^* \end{pmatrix} \tag{5}$$

amb,

$$\begin{aligned}
P' &= \tfrac{1}{2}(k_x(L+M)k_x + k_y(L+M)k_y + k_z(2M)k_z) + \tfrac{i}{2}(k_x(N-N')k_y - k_y(N-N')k_x) \\
P" &= \tfrac{1}{6}(k_x(L+5M)k_x + k_y(L+5M)k_y + 2k_z(2L+M)k_z) + \tfrac{i}{6}(k_x(N-N')k_y - k_y(N-N')k_x) \\
P"^* &= \tfrac{1}{6}(k_x(L+5M)k_x + k_y(L+5M)k_y + 2k_z(2L+M)k_z) - \tfrac{i}{6}(k_x(N-N')k_y - k_y(N-N')k_x) \\
P'^* &= \tfrac{1}{2}(k_x(L+M)k_x + k_y(L+M)k_y + k_z(2M)k_z) - \tfrac{i}{2}(k_x(N-N')k_y - k_y(N-N')k_x) \\
R &= \tfrac{1}{2\sqrt{3}}[k_x(L-M)k_x - k_y(L-M)k_y - i(k_x(N+N')k_y + k_y(N+N')k_x)] \\
R^\dagger &= \tfrac{1}{2\sqrt{3}}[k_x(L-M)k_x - k_y(L-M)k_y + i(k_y(N+N')k_x + k_x(N+N')k_y)] \\
S_- &= -\tfrac{1}{\sqrt{3}}[k_-Nk_z + k_zN'k_-] \\
S_-^\dagger &= -\tfrac{1}{\sqrt{3}}[k_zNk_+ + k_+N'k_z] \\
S_+ &= -\tfrac{1}{\sqrt{3}}[k_+Nk_z + k_zN'k_+] \\
S_+^\dagger &= -\tfrac{1}{\sqrt{3}}[k_zNk_- + k_-N'k_z] \\
C &= -\tfrac{1}{3}(k_z(N-N')k_- - k_-(N-N')k_z) \\
C^\dagger &= -\tfrac{1}{3}(k_+(N-N')k_z - k_z(N-N')k_+)
\end{aligned} \tag{6}$$

[1] Hom espera que l'Hamiltonià transformat s'escriga $S\,\mathbb{H}_{SD}\,S^{-1}$, cosa que és certa si S representa la matriu que transforma la representació matricial dels vectors escrits en una base a la representació matricial dels vectors escrits en l'altra base, matriu que *no* és la que transforma una base en una altra, com ve demostrat a l'apèndix 1. Cal dir que Chuang[6] fa ús d'una formula similar a $S^*\,\mathbb{H}_{SD}\,S^t$ (vegeu equacio 8 de [6]).

Per a poder comparar aquest resultat amb el bloc 4×4 superior de la Taula 12.4, pag. 314 del llibre de Voon [1], cal tenir en compte d'entrada que la fase utilitzada per al quart element de la base de funcions de Bloch, $|3/2, -3/2\rangle$, (o la fase dels tres primers respecte el quart, tant se val) presenta en la Taula 12.4, pag. 314 de [1] una fase contraria a la base standard que pot obtenir-se mitjançant operadors de creació i aniquilació de moment angular, la qual és acorde amb la que usa Chuang.[4]

En efecte, considerant que $|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|(X - i\,Y) \downarrow\rangle$, que $J_\pm = \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)}\,|J, M \pm 1\rangle$, per tant considerant que, en particular, $L_+ \frac{1}{\sqrt{2}}|(X - i\,Y)\rangle = \sqrt{2}\,Z$ i que $S_+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$, obtenim $J_+|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle = (L_+ + S_+)\frac{1}{\sqrt{2}}|(X - i\,Y) \downarrow\rangle = \sqrt{2}|Z \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(X - i\,Y) \uparrow\rangle$. La normalització de la funció obtinguda, $N^2(2+1) = 1$ dóna lloc a $|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{2/3}\,|Z \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|(X - i\,Y) \uparrow\rangle$.

El resultat és acorde amb la transformació eq. (4) i en canvi té la fase contrària al corresponent element que podem trobar en la pag. 33 del llibre de Voon.[1] De fet, la fase dels elements $|\frac{3}{2}, M\rangle$ amb $M = -1/2, 1/2, 3/2$ en [1] es contrària a la que podem obtenir amb operadors de creació i aniquilació de moment angular, la qual coincideix amb la de la tranformació (4). A fectes pràctics, hi ha prou a tenir en compte que la fase de $|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$ no és acorde amb la dels elements $|\frac{3}{2}, M\rangle$ amb $M = -1/2, 1/2, 3/2$, cosa que podem salvar canviant el signe dels elements (2,4), (3,4), (4,2) i (4,3) en la Taula 12.4, pag. 314 del llibre de Voon. [1]

Una vegada harmonitzada la fase, cal tenir en compte les relacions entre paràmetres, eq. (1). La comparació entre matrius és satisfactòria excepte que el parametre N que apareix en els coeficients "R" de la Taula 12.4 (elements de matriu (1,3), (2,4),(3,1) i (4,2)). La nostra derivació amb mathematica ens diu que en lloc de N ha de ser $(N + N')$. La primera cosa que resulta extrany en la Taula 12.4 és que usa el parametres (F, G, H_1, H_2) excepte per al coeficients "R". Una altra clara indicació de l'error en la taula és que el mateix autor[5] –usant un altra notació– escriu la matriu de manera que coincidiria amb els nostres resultats amb mathematica.

2 Hamiltonià de valència amb $J = 3/2$ en termes de les matrius de moment angular

Les components del moment angular per a forats, $J = 3/2$, en la base standard de funcions de Bloch resulten:[2]

[2] He comprovat que són les que resulten en aplicar els operadors que representen les components del moment angular en termes d'operadors de creació aniquilació $J_\pm$. E.g. $J_x|3/2, 3/2\rangle = (1/2)(J_+ + J_-)|3/2, 3/2\rangle = (\sqrt{3}/2)|3/2, 1/2\rangle$ i coincideix amb les matrius que hi ha en la pag. 97 de [1].

$$\mathbb{J}_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{J}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{J}_z = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{pmatrix} \tag{7}$$

L'obtenció de l'Hamiltonià (5) en termes de productes d'operadors per representacions matricials de les components i productes de components del moment angular no és immediata, però és fàcil comprovar que, a partir de les representacions matricials, eq. (7), de $\mathbb{J}_x$, $\mathbb{J}_z$ i $\mathbb{J}_z$, l'Hamiltonià (5) pot ser reescrit en la forma:

$$\begin{aligned} H_{BF} \quad = \quad & (\frac{1}{2}\sum_{i}^{x,y,z} k_i \frac{3L+M}{2} k_i)\mathbb{I}_0 - \sum_{i}^{x,y,z} k_i \frac{L-M}{3} k_i \,\mathbb{J}_i^2 + \frac{i}{3}(k_x(N-N')k_y - k_y(N-N')k_x)\,\mathbb{J}_z \\ & -\frac{1}{3}\sum_{i<j}^{x,y,z}(k_i(N+N')k_j + k_j(N+N')k_i)\{\mathbb{J}_i, \mathbb{J}_j\} \\ & +\frac{1}{6}[(k_+(N-N')k_z - k_z(N-N')k_+)\,\mathbb{J}_- + (k_z(N-N')k_- - k_-(N-N')k_z)\,\mathbb{J}_+] \end{aligned} \tag{8}$$

on, $\mathbb{I}_0$ és la matriu identitat (4×4) i $\{A, B\} = \frac{1}{2}(AB + BA)$.

3 Hamiltonià de valència amb massa constant

L'Hamiltonià de Luttinger-Kohn H_{LK} de massa constant per a la valencia és:[4]

$$H_{LK} = -\begin{pmatrix} P+Q & -S & R & 0 \\ -S^{\dagger} & P-Q & 0 & R \\ R^{\dagger} & 0 & P-Q & S \\ 0 & R^{\dagger} & S^{\dagger} & P+Q \end{pmatrix} \tag{9}$$

amb

$$\begin{aligned} P &= [\gamma_1(kx^2 + ky^2 + kz^2)]/2 \\ Q &= [\gamma_2(kx^2 + ky^2 - 2kz^2)]/2 \\ R &= [-\sqrt{3}\gamma_2(kx^2 - ky^2) + i\,2\sqrt{3}\gamma_3 kxky]/2 \\ S &= \gamma_3\sqrt{3}(kx - i\,ky)kz \\ S^{\dagger} &= \gamma_3\sqrt{3}kz(kx + i\,ky) \\ R^{\dagger} &= [-\sqrt{3}\gamma_2(kx^2 - ky^2) - i\,2\sqrt{3}\gamma_3 kxky]/2 \\ Q^{\dagger} &= Q \end{aligned} \tag{10}$$

on $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ són els anomenats paràmetres de Luttinger.

Aquest Hamiltonià H_{LK}, eq. (9), ha derivar de l'Hamiltonià H_{BF}, eq. (5), permeten la commutació dels paràmetres i els operadors k_i de moment lineal, atès que ara els paràmetres són constants. A més, per a poder efectuar la comparació cal relacionar els paràmetres usats en ambdues equacions. En fecte, si fem els canvis:

$$
\begin{aligned}
L &\to -(\gamma_1 + 4\gamma_2)/2 \quad N \to -3\gamma_3/2, \\
M &\to -(\gamma_1 - 2\gamma_2)/2 \quad N' \to -3\gamma_3/2
\end{aligned} \tag{11}
$$

hem comprovat amb mathematica que la la diferència de les dues matrius és zero.

4 Adaptació d'espín de l'Hamiltonià de valència amb massa constant

L'Hamiltonià de Stravinou-van Dalen, eq.2, amb la restricció de massa constant, i fent el canvi $N + N' \to N$, esdevé l'Hamiltonià DDK:

$$
H_{DDK} = \begin{pmatrix} Lkx^2 + M(ky^2 + kz^2) & Nkxky & Nkxkz \\ Nkxky & ky^2 L + (kx^2 + kz^2)M & Nkykz \\ Nkxkz & Nkykz & kz^2 L + (kx^2 + ky^2)M \end{pmatrix} \tag{12}
$$

Si ara afegim l'espín en la base, $\{X\uparrow, Y\uparrow, Z\uparrow, X\downarrow, Y\downarrow, Z\downarrow\}$, l'Hamiltonià H_{DDK} esdevé

$$
\mathbb{H}_{DDK} = \begin{pmatrix} H_{DDK} & 0 \\ 0 & H_{DDK} \end{pmatrix} \tag{13}
$$

Procedim ara a adaptar d'espín la base amb la tranformació S, eq. 4. Ho fem, de manera anàloga al cas de massa variable, amb la tranformació $S^* \mathbb{H}_{DDK} S^t$. Desprès efectuem els canvis $L = -(\gamma_1 + 4\gamma_2)/2$, $M = -(\gamma_1 - 2\gamma_2)/2$ i $N = -3\gamma_3$ i obtenim:[3]

$$
S^* \, \mathbb{H}_{DDK} \, S^t = - \begin{pmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -S/\sqrt{2} & \sqrt{2}R \\ -S^\dagger & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{3/2}S \\ R^\dagger & 0 & P-Q & S & \sqrt{3/2}S^\dagger & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^\dagger & S^\dagger & P+Q & -\sqrt{2}R^\dagger & -S^\dagger/\sqrt{2} \\ -S^\dagger/\sqrt{2} & -\sqrt{2}Q^\dagger & \sqrt{3/2}S & -\sqrt{2}R & P(+\Delta) & 0 \\ \sqrt{2}R^\dagger & \sqrt{3/2}S^\dagger & \sqrt{2}Q^\dagger & -S/\sqrt{2} & 0 & P(+\Delta) \end{pmatrix} \tag{14}
$$

amb

[3] Cridem l'atenció en el fet que les relacions entre els paràmetres L, M, N i els paràmetres de Luttinger $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ que trobem en la pag. 107 del llibre Voon,[1] són les mateixes fórmules per a N , però no per a L i M. Hi ha un factor aditiu 1 que no quadra. Allí diu, per exemple que $L = -(\gamma_1 + 4\gamma_2 + 1)/2$. Amb aquest canvi per a L no es pot retrobar l'Hamiltonià de Chuang.[4]

$$
\begin{array}{rcl}
P & = & [\gamma_1(kx^2+ky^2+kz^2)]/2 \\
Q & = & [\gamma_2(kx^2+ky^2-2kz^2)]/2 \\
R & = & [-\sqrt{3}\gamma_2(kx^2-ky^2)+i\,2\sqrt{3}\gamma_3 kxky]/2 \\
S & = & \gamma_3\sqrt{3}(kx-i\,ky)kz \\
S^\dagger & = & \gamma_3\sqrt{3}kz(kx+i\,ky) \\
R^\dagger & = & [-\sqrt{3}\gamma_2(kx^2-ky^2)-i\,2\sqrt{3}\gamma_3 kxky]/2 \\
Q^\dagger & = & Q
\end{array}
\tag{15}
$$

el qual coincideix amb Chuang.[4] Fixem-nos que els dos termes diagonals inferiors de l'eq. (14) contenen un parèntesi $(+\Delta)$. Hem afegit aquests parèntesis per a que la comparació amb Chuang siga perfecta, malgrat que l'Hamiltonià $\mathbb{H}_{DDK}$ no conté els termes *split-off* que deriven del espín-orbita i marquen una separació energètica entre estats amb el mateix ℓ i s ($\ell = 1$ i $s = 1/2$ en aquest cas) i diferent j ($j = 3/2$ per a heavy/light hole i $j = 1/2$ per als forats de *split-off*.

5 Els termes de *split-off*

En la base adaptada d'espín la matriu d'espín-orbita és:

$$
H_\Delta = \Delta \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{16}
$$

En la base $\{X\uparrow, Y\uparrow, Z\uparrow, X\downarrow, Y\downarrow, Z\downarrow\}$ caldrà calcular $H'_\Delta = S^t\, H_\Delta\, S^*$ que resulta:

$$
H'_\Delta = S^t\, H_\Delta\, S^* = \frac{\Delta}{3} \begin{pmatrix} 1 & i & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -i & 1 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 1 & 1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & i & i & 1 & 0 \\ -1 & -i & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{17}
$$

Ara podem corregir l'origen d'energia restant $\frac{\Delta}{3}$ a la diagonal obtenint finalment:

$$H'_{\Delta corr} = \frac{\Delta}{3}\begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & i & i & 0 & 0 \\ -1 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{18}$$

6 En termes d'invariants

Escrivim l'hamiltonià de Luttinger H_L en termes d'invariants:[7]

$$\begin{aligned} H_L \quad = \quad & \tfrac{1}{m_0}[(\gamma_1 + \tfrac{5}{2}\gamma_2)\tfrac{k^2}{2}\ I_0 - \gamma_2(k_x^2 J_x^2 + k_y^2 J_y^2 + k_z^2 J_z^2) \\ & -2\gamma_3(\{k_x, k_y\}\{J_x, J_y\} + \{k_y, k_z\}\{J_y, J_z\} + \{k_z, k_x\}\{J_z, J_x\})] \end{aligned} \tag{19}$$

on m_0 és la massa de l'electró lliure, γ_i són els paràmetres the Luttinger , $k_j = -i\hbar\partial_j$ és la component j del moment lineal, I_0 és la matriu identitat, $\{A, B\} = \frac{1}{2}(AB + BA)$ i J_i és la component i del moment angular amb nombre quàntic $J = 3/2$.

Considerem ara les representacions matricials de les component del moment angular en la base $\{X, Y, Z\}$ (vegeu la deducció en l'apèndix 2):

$$\mathbb{I}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{I}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{I}_z = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{20}$$

L'Hamiltonià de Stravinou-van Dalen amb la restricció de massa constant, eq. (12), pot ser escrit

$$\begin{aligned} H_{DDK} \quad = \quad & (kxLkx + kyLky + kzLkz)\mathbb{I}_0 + \\ & \left[kx(M-L)kx\ \mathbb{I}_x^2 + ky(M-L)ky\ \mathbb{I}_y^2 + kz(M-L)kz\ \mathbb{I}_z^2\right] + \\ & 2\left[kxNky\{I_x, I_y\} - kxNkz\{I_x, I_z\} + kyNkz\{I_x, I_z\}\right] \end{aligned} \tag{21}$$

Considerem ara les matrius:[7](veure també [1] pag. 82)

$$\mathbb{I}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{I}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{I}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{22}$$

Aquestes matrius, com senyala Luttinger,[7] tenen les mateixes regles de commutació que les components del moment angular i la suma dels seus quadrats és el doble de la matriu identitat. Per tant es corresponen amb un moment angular unitat. No obstant això cal aclarir que no tenen les fases que haurien de tenir si les obtenim pels mètodes standard dels operadors de creació aniquilació (vegeu apèndix 2) i per tant cal anar en compte a l'hora de manipular les equacions en que intervenen aquestes matrius en forma no explícita. En termes de les matrius (22) l'Hamiltonià de Stravinou-van Dalen adquireix una forma més simetrica en terme d'invariants:

$$\begin{aligned} H_{DDK} &= (kxLkx + kyLky + kzLkz)\mathbb{I}_0 + \\ & \left[kx(M-L)kx\ \mathbb{I}_x^2 + ky(M-L)ky\ \mathbb{I}_y^2 + kz(M-L)kz\ \mathbb{I}_z^2\right] - \\ & 2\left[kxNky\{\mathbb{I}_x,\mathbb{I}_y\} + kxNkz\{\mathbb{I}_x,\mathbb{I}_z\} + kyNkz\{\mathbb{I}_y,\mathbb{I}_z\}\right] \end{aligned} \tag{23}$$

Finalment, l'Hamiltonià de Stravinou-van Dalen amb massa variable, eq. (2), també pot ser escrit en termes d'operadors multiplicats per components del moment angular i els seus productes. Considerem les representacions matricials standard, obtingudes amb creadors i aniquiladors, de les component del moment angular en la base $\{X,Y,Z\}$, eq. (20). En termes d'aquestes matrius hem comprovat amb mathematica que podem expressar l'Hamiltonià de Stravinou-van Dalen H_{SD} en la forma:

$$\begin{aligned} H_{SD} &= \frac{1}{3}\left[kx(L+2M)kx + ky(L+2M)ky + kz(L+2M)kz\right]\mathbb{I}_0 - \\ & -\left[kx(L-M)kx(\mathbb{I}_x^2 - \frac{1}{3}\mathbb{I}^2) + ky(L-M)ky(\mathbb{I}_y^2 - \frac{1}{3}\mathbb{I}^2) + kz(L-M)kz(\mathbb{I}_z^2 - \frac{1}{3}\mathbb{I}^2)\right] + \\ & (kxNky + kyN'kx)(\{\mathbb{I}_x,\mathbb{I}_y\} - \frac{i}{2}\,\mathbb{I}_z) + (kxN'ky + kyNkx)(\{\mathbb{I}_x,\mathbb{I}_y\} + \frac{i}{2}\,\mathbb{I}z) - \\ & (kxN'kz + kzNkx)(\{\mathbb{I}_x,\mathbb{I}_z\} - \frac{i}{2}\,,\mathbb{I}y) - (kxNkz + kzN'kx)(\{\mathbb{I}_x,\mathbb{I}_z\} + \frac{i}{2}\,\mathbb{I}y) + \\ & (kyNkz + kzN'ky)(\{\mathbb{I}_y,\mathbb{I}_z\} - \frac{i}{2}\,\mathbb{I}_x) + (kyN'kz + kzNky)(\{\mathbb{I}_y,\mathbb{I}_z\} + \frac{i}{2}\,\mathbb{I}_x). \end{aligned} \tag{24}$$

L'avantatge d'usar aquestes expressions per als operadors és la senzillesa d'efectuar una rotació en l'Hamiltonià. En efecte, si tenim que la rotació fa que $x'_i = \sum_j m_{ij}x_j$, aleshores, escrivim l'Hamiltonià rotat en termes de moments lineals rotats k'_i matrius rotades $\mathbb{I}'_i$. Aleshores, apliquem $x'_i = \sum_j m_{ij}x_j$ per $k'_i = x'_i$ i també per a $\mathbb{I}'_i = x'_i$, i ja tenim la matriu Hamiltoniana rotada.

7 Rotació de l'estructura cristal·lina i Hamiltonià 4×4 de forats $\mathbb{H}_{4s}$

Si disposem de l'Hamiltonià escrit en forma de suma de productes de funcions de les components del moment lineal i de paràmetres $f_i(k_x,k_y,k_z,\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)$ per matrius representació del moment angular $\mathbb{J}_i$ i els seus productes, que representem genèricament $\mathbb{M}_i$ (eqs. 8, 19, 23, 24). És a dir, si:

$$\mathbb{H}_{4s} = \sum_i f_i(k_x \ldots \gamma_3)\,\mathbb{M}_i \tag{25}$$

i procedim a efectuar una rotació U, aquesta converteix k_i en $k'_i = \sum_j U_{ij}k_j$ i $\mathbb{J}_i$ en $\mathbb{J}'_i = \sum_j U_{ij}\mathbb{J}_j$. Aleshores, subtituïm k_i i $\mathbb{J}_i$ per k'_i i $\mathbb{J}'_i$ en $\mathbb{H}_{4s}$, eq. 25, simplifiquem i ja tenim l'Hamiltoniá rotat $\mathbb{H}'_{4s}$.

Un poc més laboriós resulta efectuar la rotació si l'Hamiltonià el tenim en forma de matriu sobre una base donada adaptada d'espín. Si anomenem U a la matriu 3×3 que efectua la rotació en l'espai ordinari (que és la que converteix k_i i $\mathbb{J}_i$ en k'_i i $\mathbb{J}'_i$), aquesta mateixa matriu també rota la base de funcions $\{X, Y, Z\}$ generant la base rotada $X'_i = \sum_j U_{ij} X_j$ (on X_i per a $i = 1, 2, 3$ representa X, Y, Z).

A partir de la matriu U, que d'ara en avant representarem per $\mathbb{M}_r$ (matriu que actua sobre el vector real r), caldrà determinar la matriu $\mathbb{M}_s$ que efectua la rotació sobre les funcions d'espin ($|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$), de manera que el producte extern $\mathbb{M}_t = \mathbb{M}_s \otimes \mathbb{M}_r$ efectuarà la rotació de la base amb espín de dimensió sis, la qual és el producte extern $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \otimes \{X, Y, Z\}$. L'obtenció de $\mathbb{M}_r$, $\mathbb{M}_s$ i $\mathbb{M}_t$ se detallarà en les dues seccions següents. Ara suposarem que coneixem $\mathbb{M}_t$. Aquesta matriu actua sobre la base amb espín $\{X_i \sigma_j,\ i = x, y, z\ j =\uparrow, \downarrow\}$ però no sobre la base adaptada d'espín. El pas d'una a altra base el proporciona la matriu S, eq. (4).

Per tant, abans de rotar la matriu Hamiltoniana caldrà desadaptar-la de espín. Si anomenem $\mathbb{H}_{6s}$ a la matriu adaptada d'espín i $\mathbb{H}_{6X}$ a la matriu en la base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \otimes \{X, Y, Z\}$ no adaptada tenim:

$$\mathbb{H}_{6X} = S^t\, \mathbb{M}_{6s}\, S^* \tag{26}$$

Una volta obtinguda $\mathbb{H}_{6X}$, efectuem la rotació. Per una banda substituïm k_i per $k'_i = \sum_j (\mathbb{M}_r)_{ij} k_j$ en $\mathbb{H}_{6X}$ i a la matriu resultant $\mathbb{H}'_{6X}$ li rotem la base fins obtenir $\mathbb{H}'_{6X'}$ (vegeu eq. 56 en apèndix 1):

$$\mathbb{H}'_{6X'} = \mathbb{M}_t^t\, \mathbb{M}'_{6X}\, (\mathbb{M}_t^t)^{-1} \tag{27}$$

Finalment, tornem a adaptar d'espín obtenint la matriu desitjada $\mathbb{H}_{6s}^{rot}$

$$\mathbb{H}_{6s}^{rot} = S^*\, \mathbb{H}'_{6X'}\, S^t \tag{28}$$

Si volem comparar els dos procediments hi ha un problema que hem de salvar: $\mathbb{H}_{4s}$ és una matriu 4×4 mentre que $\mathbb{H}_{6s}$ és una matriu 6×6. És cert que el bloc superior 4×4, $\mathbb{H}_{6s}^{4\times4}$, de $\mathbb{H}_{6s}$ es correspon amb la base en que escrivim $\mathbb{H}_{4s}$ i, per tant, abans d'efectuar la rotació $\mathbb{H}_{4s} = \mathbb{H}_{6s}^{4\times4}$. Ara be, la rotació permet l'acoblament entre elements amb $J = 3/2$ (HH i LH) i $J = 1/2$ (*split-off*). Per tant, per tal d'obtenir el mateix resultat en un i altre procediment cal evitar aquest acoblament. Açò ho podem aconseguir modificant la matriu inicial $\mathbb{H}_{6s}$ fent zero els blocs extradiagonals que acoblen HH, LH amb *split-off*. És a dir, fer que $(\mathbb{H}_{6s})_{ij} = 0$ per a $i = 5, 6$ $j = 1, 2, 3, 4$ i per a $i = 1, 2, 3, 4$ $j = 5, 6$, de manera que $\mathbb{H}_{6s}$ passa a ser una matriu amb un bloc 4×4 i un bloc 2×2. Hem comprovat amb mathematica que els dos procediments donen lloc al mateix resultat.

En les seccions següents obtindrem les matrius $\mathbb{M}_r$, $\mathbb{M}_s$ i $\mathbb{M}_t$. Cal dir que la matriu 6×6 $\mathbb{M}_t$ que obtenim presenta un canvi de signe en l'element $(\mathbb{M}_t)_{6,5}$ respecte de la matriu que trobem en el paper de Chuang.[6] Estem convençuts que el nostre resultat és correcte i que simplement hi ha un typo en l'esmentat paper.

8 Rotació: Angles d'Euler. Rotació del vector de posició i del vector d'espín

Una rotació requereix tres paràmetres. En les presents notes seguirem el criteri de les rotacions i definició d'angles que hom pot trobar en molt llibres de simetria[8, 9] – vegeu figura adjunta. En primer lloc efectuem una rotació $R(\gamma, z_0)$ d'angle γ al voltant de l'eix z original, seguida d'una rotació $R(\beta, y_1)$ al voltant de l'eix y que resulta de la primera rotació i finalment una rotació $R(\alpha, z_2)$.

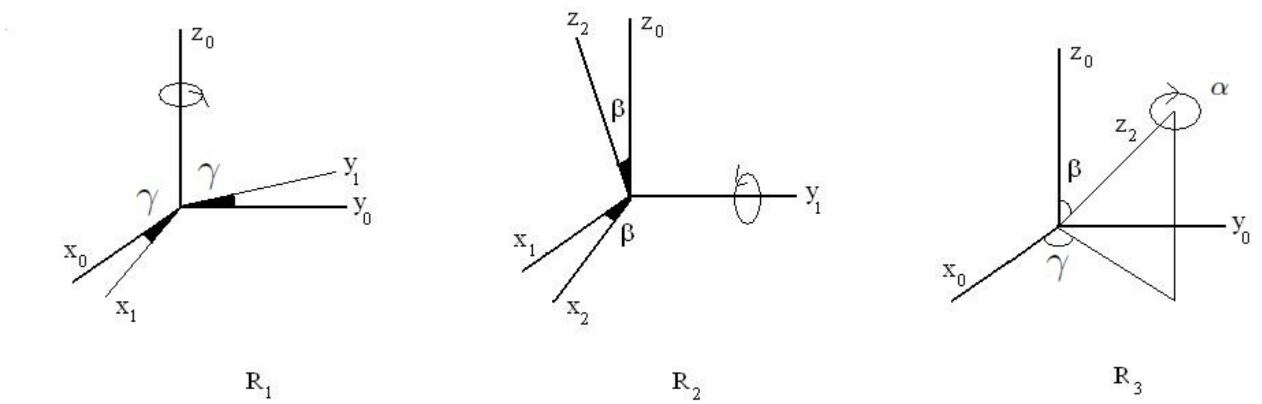


Figure 1: Rotació i angles d'Euler, criteri standard de teoria de grups.

Les matriu associades amb aquestes rotacions són:

$$\mathbb{R}(\gamma, z_0) = \begin{pmatrix} \cos\gamma & \sin\gamma & 0 \\ -\sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{29}$$

$$\mathbb{R}(\beta, y_1) = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & -\sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} \tag{30}$$

$$\mathbb{R}(\alpha, z_2) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & 0 & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{31}$$

de manera que la rotació general és $R_{tot} = R(\alpha, z_2)R(\beta, y_1)R(\gamma, z_0)$. Ara be, per a canviar la direcció d'un vector des de la posició orientada en l'eix z fins una direcció final definida per $(\theta = \beta, \gamma = \phi)$ hi ha prou amb les dues primeres rotacions, de manera que la matriu de rotació és simplement

$$\mathbb{R}(\theta, y_1)\mathbb{R}(\phi, z_0) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi & \cos\theta\sin\phi & -\sin\theta \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ \sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{32}$$

que coincideix amb la matriu de rotació del llibre de Voon[1] (pag. 59) i la del de Chuang[4] (pag. 125).

En l'article de Palazzolo[10] la matriu que permet fer la rotació d'un angle donat al voltant d'un eix de rotació determinat és funció de quatre paràmetres: els tres angles que forma l'eix de rotació amb els tres eixos coordenats originals, més l'angle de rotació al voltant d'aquest. En termes d'angles d'Euler hi ha prou en tres paràmetres: els dos angles que determinen l'eix de rotació en coordenades esfèriques, més l'angle de rotació.

9 Rotació de l'espín vs. rotació del vector de posició

Si anomenem u al vector unitari en una determinada direcció, una rotació d'angle ϕ al voltant de l'eix en la direcció d'aquest vector podem escriure-la en la forma $C_u^\phi = e^{-i\frac{\phi}{\hbar}L\cdot u}$ on L és el moment angular. Si la rotació és al voltant de l'eix z, aleshores, $R_\phi = e^{-i\phi\hat{L}_z/\hbar}$. Si la rotació actua sobre una funció d'espín, el moment angular que genera la rotació és $\hat{S}_z$ i no $\hat{L}_z$. Considerem doncs una rotació $\phi = 2\pi$ sobre la funció d'espín $|\alpha\rangle$:

$$e^{-i2\pi\hat{S}_z/\hbar}|\alpha\rangle = e^{-i2\pi(\hbar/2)/\hbar}|\alpha\rangle = -|\alpha\rangle \tag{33}$$

Veiem que canvia de signe, com ho fan totes les funcions de moment angular fraccionari, funcions que són bases del grup doble del grup de rotacions. Si l'angle de rotació és $\phi = 4\pi$ aleshores no hi ha canvi de signe. En altres paraules, la rotació d'un angle ϕ sobre una funció d'espín és com una rotació *efectiva* $\phi/2$. Chuang[6] relaciona la rotació del eixos (3D) definida pels angles (θ, ϕ) amb la rotació de les funcions d'espín (2D) definida per angles $(\theta/2, \phi/2)$. En particular, asociada amb la matriu de rotació (32), la rotació de les funcions d'espín afirma que ve donada per la matriu:

$$\begin{pmatrix} e^{-i\phi/2}\cos\theta/2 & e^{i\phi/2}\sin\theta/2 \\ -e^{-i\phi/2}\sin\theta/2 & e^{i\phi/2}\cos\theta/2 \end{pmatrix} \tag{34}$$

La relació entre les rotacions en l'espai real 3D i l'espai complex 2D està relacionada amb l'homomorfisme que hi ha entre els grups $SO(3)$ de les rotacions en l'espai real 3D i $SU(2)$ de les rotacions en l'espai complex 2D.[11] En les notes presents poposem una alternativa simple per a obtenir aquesta relació.

Considerem les matrius de Pauli $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ i $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ i el vector d'espin $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^t$. Considerem també el vector de posicio $r = (x, y, z)^t$.

Sabem que el producte escalar $r^t \cdot \sigma$ és un invariant.[4]

[4] Hi ha prou en adonar-se que:

$$r^t \cdot \sigma = r^t \cdot \mathbb{I} \cdot \sigma = (\,x \quad y \quad z\,) \cdot \mathbb{R}^t \cdot \mathbb{R} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} = (\,x' \quad y' \quad z'\,) \cdot \begin{pmatrix} \sigma'_x \\ \sigma'_y \\ \sigma'_z \end{pmatrix} = r'^t \cdot \sigma'$$

Considerem ara la forma $r^t \cdot \mathbb{R} \cdot \sigma$ que podem visualitzar de dues formes equivalents:

$$r^t \cdot \mathbb{R} \cdot \sigma = (\mathbb{R}^t \cdot r)^t \cdot \sigma = r^t \cdot (\mathbb{R} \cdot \sigma) \tag{35}$$

La primera cosa que ens diu l'eq. (35) és que és equivalent rotar de l'espín σ que fer una rotació *inversa* del vector de posició r. És a dir, els angles d'una i altra rotació són de signes opostos.

Reescrivim l'equació (35) en la forma:

$$x\sigma_{x'} + y\sigma_{y'} + z\sigma_{z'} = x'\sigma_x + y'\sigma_y + z'\sigma_z = \begin{pmatrix} z' & x' - iy' \\ x' + iy' & z' \end{pmatrix} \tag{36}$$

considerem les rotacions complexes unimodulars $u = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$ amb $aa^* + bb* = 1$. Aquesta tranformació aplicada a la component σ_x la tranforma en $\sigma_{x'}$, σ_y la tranforma en $\sigma_{y'}$ y σ_z la tranforma en $\sigma_{z'}$:

$$\sigma_{x'} = u \cdot \sigma_x \cdot u^\dagger = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ab^* + ba^* & a^2 - b^2 \\ (a^*)^2 - (b^*)^2 & -(b^*a + a^*b) \end{pmatrix} \tag{37}$$

$$\sigma_{y'} = u \cdot \sigma_y \cdot u^\dagger = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} a^*b - b^*a & -(a^2 + b^2) \\ (a^*)^2 + (b^*)^2 & ab^* - a^*b \end{pmatrix} \tag{38}$$

$$\sigma_{z'} = u \cdot \sigma_z \cdot u^\dagger = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^*a - b^*b & -(ab + ba) \\ -(a^*b^* + b^*a^*) & bb^* - aa^* \end{pmatrix} \tag{39}$$

Des de les eqs. (36), (37), (38) i (39), tenint en compte que $x' = [(x' - iy') + (x' + iy')]/2$ i que $y' = -i[(x' + iy') - (x' - iy')]/2$, trobem que:

$$z' = x(ab^* + ba^*) + i\,y\,(a^*b - b^*a) + z(aa^* - bb^*) \tag{40}$$

$$x' = x\,\frac{1}{2}\left[a^2 + (a^*)^2 - b^2 - (b^*)^2\right] + \frac{i}{2}\,y\,\left[(b^*)^2 + (a^*)^2 - a^2 - b^2\right] - z\,(ab + a^*b^*) \tag{41}$$

$$y' = x\,\frac{i}{2}\left[-(a^*)^2 + (b^*)^2 + a^2 - b^2\right] + \frac{1}{2}\,y\,\left[(b^*)^2 + (a^*)^2 + a^2 + b^2\right] - z\,i\,(b^*a^* - ab) \tag{42}$$

Amb la qual cosa hem trobat una relació entre les matrius de rotació complexa 2D $u = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$ i la matriu *real* [5] 3D:

$$R = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\left[a^2 + (a^*)^2 - b^2 - (b^*)^2\right] & \frac{i}{2}\left[(b^*)^2 + (a^*)^2 - a^2 - b^2\right] & -(ab + a^*b^*) \\ \frac{i}{2}\left[-(a^*)^2 + (b^*)^2 + a^2 - b^2\right] & \frac{1}{2}\left[(b^*)^2 + (a^*)^2 + a^2 + b^2\right] & i\,(b^*a^* - ab) \\ (ab^* + ba^*) & i\,(a^*b - b^*a) & (aa^* - bb^*) \end{pmatrix}.$$

[5] Cal notar que tots els elements d'aquesta matriu són combinacins reals de nombres complexos.

Considerem ara el cas particular $a = e^{i\,\phi/2}, b = 0$ que es tradueix en les matrius:

$$R_1 = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad u_1 = \begin{pmatrix} e^{-i\,\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\,\phi/2} \end{pmatrix}$$

on hem canviat el signe de ϕ en la segon matriu respecte de la primera, atès que com hem vist cal considerar, en realitat, rotacions oposades.

Anàlogament, el cas $a = \cos\theta/2$, $b = -\sin\theta/2$ es tradueix en les matrius:

$$R_2 = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \qquad u_2 = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 & \sin\theta/2 \\ -\sin\theta/2 & \cos\theta/2 \end{pmatrix}$$

on també hem canviat el signe de θ en la segon matriu respecte de la primera.

Finalment, si considerem la rotació completa $R_2 \cdot R_1$, caldrà relacionar-la amb $u_2 \cdot u_1$:

$$R_2 \cdot R_1 = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi & \cos\theta\sin\phi & -\sin\theta \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ \sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$u_2 \cdot u_1 = \begin{pmatrix} e^{-i\,\phi/2}\cos\theta/2 & e^{i\,\phi/2}\sin\theta/2 \\ -e^{-i\,\phi/2}\sin\theta/2 & e^{i\,\phi/2}\cos\theta/2 \end{pmatrix}$$

que coincideix amb les eq. 1 i 3 de Chuang.[6]

Finalment, el cas particular $a = \cos\frac{\theta}{2}, b = -\sin\frac{\theta}{2}$ es tradueix en les matrius:

$$R_1 = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \qquad u_1 = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

Mentre que el cas $a = e^{-i\,\phi/2}, b = 0$ es tradueix en les matrius:

$$R_2 = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad u_2 = \begin{pmatrix} e^{-i\,\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\,\phi/2} \end{pmatrix}$$

De manera que:

$$R_2 \cdot R_1 = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi & -\sin\phi & \cos\phi\sin\theta \\ \cos\theta\sin\phi & \cos\phi & \sin\theta\sin\phi \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$u_2 \cdot u_1 = \begin{pmatrix} e^{-i\,\phi/2}\cos\theta/2 & -e^{-i\,\phi/2}\sin\theta/2 \\ e^{i\,\phi/2}\sin\theta/2 & e^{i\,\phi/2}\cos\theta/2 \end{pmatrix}$$

10 Rotació simultània de les funcions d'espai i d'espín

Considerem la matriu de rotació: ([1] pag.59,[4] pag. 125,[6])

$$M_r = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi & \cos\theta\sin\phi & -\sin\theta \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ \sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{43}$$

que passa de la base $\{X, Y, Z\}$ a la base $\{X', Y', Z'\}$: $(X', Y', Z')^t = M_r\,(X, Y, Z)^t$, on $(X', Y', Z')^t$, $(X, Y, Z)^t$ són les transpostes dels vectors fila (X', Y', Z'), (X, Y, Z). És a dir, els corresponents vector columna. La matriu de rotació d'espín,[6]

$$M_s = \begin{pmatrix} e^{-i\,\phi/2}\cos\theta/2 & e^{i\,\phi/2}\sin\theta/2 \\ -e^{-i\,\phi/2}\sin\theta/2 & e^{i\,\phi/2}\cos\theta/2 \end{pmatrix} \tag{44}$$

passa, anàlogament, de la base $\{\uparrow, \downarrow\}$ a la base $\{\uparrow', \downarrow'\}$.

La base $\{X\uparrow, Y\uparrow, Z\uparrow, X\downarrow, Y\downarrow, Z\downarrow\}$ és el producte extern $\{\uparrow, \downarrow\} \otimes \{X, Y, Z\}$.[6] (Acudiu a l'apèndix 3 per a més detalls sobre com s'efectua, que és i quines propietats té el producte directe de matrius).

Per tant, la matriu que passa de la base $\{X\uparrow, Y\uparrow, Z\uparrow, X\downarrow, Y\downarrow, Z\downarrow\}$ a la base $\{X'\uparrow', Y'\uparrow', Z'\uparrow', X'\downarrow', Y'\downarrow'$ $, Z'\downarrow'\}$ serà el producte directe $M_s \otimes M_r$:[7]

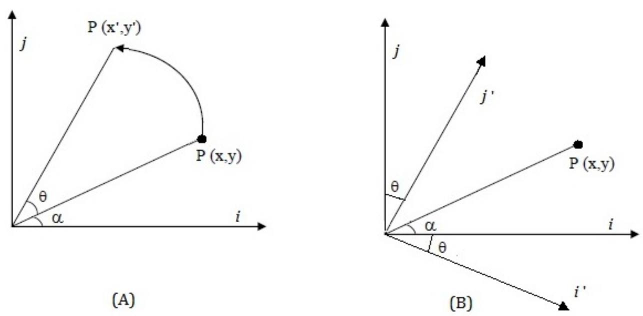
$$M_s \otimes M_r = \begin{pmatrix}
\cos\phi\cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \sin\phi\cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & -\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \cos\phi\cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \sin\phi\cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & -\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} \\
-\sin\phi\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \cos\phi\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & 0 & -\sin\phi\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \cos\phi\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & 0 \\
\cos\phi\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \sin\phi\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \cos\phi\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \sin\phi\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} \\
-\cos\phi\cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & -\sin\phi\cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \cos\phi\cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \sin\phi\cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & -\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} \\
\sin\phi\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & -\cos\phi\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & 0 & -\sin\phi\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \cos\phi\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & 0 \\
-\cos\phi\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & -\sin\phi\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & -\cos\theta\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2} & \cos\phi\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \sin\phi\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2} & \cos\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}
\end{pmatrix} \tag{45}$$

[6] Cal adonar-se que el producte extern $\{X, Y, Z\} \otimes \{\uparrow, \downarrow\}$ dóna lloc a la base permutada $\{X\uparrow, X\downarrow, Y\uparrow, Y\downarrow, Z\uparrow, Z\downarrow\}$.
[7] I no serà el producte $M_r \otimes M_s$, ja que es correspondria amb la base permutada.

11 Apèndix 1: Sobre rotacions

11.1 Rotació de les coordenades vs. rotació dels eixos

Quan parlem de rotació de coordenades i diem que passem d'unes coordenades (x, y) a unes coordeandes (x', y'), be considerem els eixos fixos i rotem el punt $P(x, y)$, de manera que passa a una posició $P(x', y')$ respecte dels eixos fixos –figura 11.1A– o be considerem que el punt està fix i els eixos roden en sentit contrari –figura 11.1B– Les dues accions han de portar a situacions equivalents.



En efecte, escrivim:

$$(\,x \quad y\,)\,\mathbb{R}\begin{pmatrix} i \\ j \end{pmatrix} = (\,x \quad y\,)\begin{pmatrix} i' \\ j' \end{pmatrix} \tag{46}$$

O alternativament:

$$(\,x \quad y\,)\,\mathbb{R}\begin{pmatrix} i \\ j \end{pmatrix} = \left[\mathbb{R}^t\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}\right]^t\begin{pmatrix} i \\ j \end{pmatrix} = (\,x' \quad y'\,)\begin{pmatrix} i \\ j \end{pmatrix}. \tag{47}$$

És a dir, rotar els eixos amb la matriu $\mathbb{R}$ equival a rotar les coordenades amb la matriu inversa $\mathbb{R}^t$.[8]

Si en la figura 11.1 considerem que P té longitud unitat, aleshores $x = \cos\alpha$, $y = \sin\alpha$, $x' = \cos(\alpha + \theta) = x\cos\theta - y\sin\theta$ i $y' = \sin(\alpha + \theta) = y\cos\theta + x\sin\theta$. En forma matricial

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \tag{48}$$

Tanmateix, de la figura 11.1B que representa la rotació inversa dels eixos, tenim que: $i' = i\cos\theta - j\sin\theta$, $j' = i\sin\theta + j\cos\theta$, que en forma matricial queda:

$$\begin{pmatrix} i' \\ j' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} i \\ j \end{pmatrix} \tag{49}$$

És a dir, la mateixa matriu $\mathbb{R}$ que efectua una rotació de les coordenades, efectua la rotació inversa dels eixos. Cal para atenció però a que mentre que les coordenades les escrivim en forma de matriu fila, els vectors directors

[8]En aquest cas, per tractar-se de rotacions en l'espai real, la inversa és simplement la transposta.

dels eixos els escrivim en forma de matriu columna. Per tant, atès que les matrius que actuen sobre files i columnes són transpostes una de l'altra, les equacions equivalents són:

$$\begin{pmatrix} x' & y' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i \\ j \end{pmatrix} = \left[\mathbb{R}^t \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right]^t \begin{pmatrix} i \\ j \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i' \\ j' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \mathbb{R} \begin{pmatrix} i \\ j \end{pmatrix} \tag{50}$$

que és immediat comprovar que donen el mateix resultat.

11.2 Rotació dela base vs. rotació del vector expressat en aquesta base

Imaginem dues bases x i x' de vectors relacionades mitjançat la matriu S de canvi de base:

$$x'_i = \sum_j S_{ij} x_j \tag{51}$$

Anomenem v_a i v_α les matrius columna representació del vector v en les bases x i x', respectivament. Aleshores escrivim:

$$v = \sum_i \alpha_i x'_i = \sum_j a_j x_j \tag{52}$$

Tanmateix podem escriure que:

$$\sum_i \alpha_i x'_i = \sum_i \alpha_i \sum_j S_{ij} x_j = \sum_j \left(\sum_i S_{ij} \alpha_i \right) x_j = \sum_j \left(\sum_i S^t_{ji} \alpha_i \right) x_j = \sum_j a_j x_j \tag{53}$$

És a dir, $v_a = S^t v_\alpha$. Anàlogament, considerem un altre vector w amb representacions w_b i w_β en les bases x i x', respectivament. També podem escriure que

$$\sum_i b_i x_i = \sum_i b_i \sum_j S^{-1}_{ij} x'_j = \sum_j \left(\sum_i (S^{-1})^t_{ji} b_i \right) x'_j = \sum_j \beta_j x'_j \tag{54}$$

És a dir, $w_\beta = (S^{-1})^t w_b$.

Finalment, considerem una aplicació lineal representada per la matriu M en la base x, $M : x \to x$, de manera que $w_b = M v_a$. En preguntem la forma de la matriu M' que representa la mateixa aplicació lineal en la base x'. Per tal de constestar considerem l'esquema $v_\alpha \to v_a \to w_b \to w_\beta$ i allò que volem saber és quina M' fa el pas global: $M' v_\alpha = w_\beta$.

A partir que $v_a = S^t v_\alpha$, $w_\beta = (S^{-1})^t w_b$ i que $w_b = M v_a$ teninm que:

$$w_\beta = (S^{-1})^t w_b = (S^{-1})^t M v_a = (S^{-1})^t M S^t v_\alpha = M' v_\alpha \tag{55}$$

Per tant, $M' = (S^{-1})^t M S^t$. Si S és unitària, aleshores $S^{-1} = S^\dagger$ i $M' = S^* M S^t$.

11.2.1 El cas de la rotació de l'Hamiltonià

Considerem ara el cas que tenim una matriu Hamiltoniana definida com una aplicació lineal de l'espai de funcions en si mateix quan aquest espai esta expandit per a base n-dimensional $\{x_i\}$, $\mathbb{H}_x : \{x_i\} \to \{x_i\}$. De la mateixa manera que ja hem discuit amb anterioritat, una funció (o un vector) ve donat en la base $\{x_i\}$ pel producte matricial:

$$v = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & ... & a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ ... \\ x_n \end{pmatrix}$$

Considerem ara, com abans, la identitat:

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & ... & a_n \end{pmatrix} \cdot \left[\mathbb{R} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ ... \\ x_n \end{pmatrix} \right] = \left[\mathbb{R}^t \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ ... \\ a_n \end{pmatrix} \right]^t \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ ... \\ x_n \end{pmatrix}$$

que ens diu que si una matriu $\mathbb{R}$ transforma la base, la seua transposta tranforma la representació matricial d'un vector expressat en aquesta base.

Imaginem ara que l'acció de $\mathbb{H}_x$ sobre la representació matricial v_a en la base x dóne lloc al vector w_b expressat en la mateixa base. Escrivim

$$w_b = \mathbb{H}_x v_a$$

Anomenem $\mathbb{R}$ la rotació que converteix la base x en la base x'. Per tant, $\mathbb{R}^t$ passa la representació d'un vector en la base x a la seua representació en la base x':

$$v_\alpha = \mathbb{R}^t v_a$$

De igual manera, $(\mathbb{R}^t)^{-1} = (\mathbb{R}^{-1})^t$ efectua el canvi invers:

$$v_a = (\mathbb{R}^{-1})^t v_\alpha.$$

Per tant, si considerem un vector incial v_α que el rotem fins a convertir-lo en

$$v_a = (\mathbb{R}^{-1})^t v_\alpha,$$

tot seguit apliquem $\mathbb{H}_x$ sobre v_a convertint-lo en w_b:

$$w_b = \mathbb{H}_x (\mathbb{R}^{-1})^t v_\alpha,$$

tot seguit rotem aquest vector resultant, que està escrit en la base x, fins a convertirlo en w_β, que està escrit enm la base x',

$$w_\beta = \mathbb{R}^t \mathbb{H}_x (\mathbb{R}^{-1})^t v_\alpha,$$

tenim que la matriu que actuant sobre v_α dóna lloc a w_β és:

$$\mathbb{H}_{x'} = \mathbb{R}^t \mathbb{H}_x (\mathbb{R}^{-1})^t \tag{56}$$

12 Apèndix 2: Obtenció de les representacions del moment angular

Cal tenir en compte que $I_{\pm}|\ell,m\rangle = \sqrt{\ell(\ell+1)-m(m\pm 1)}|\ell,m\pm 1\rangle$, que $I_x = \frac{1}{2}(I_+ + I_-)$, $I_y = \frac{1}{2i}(I_+ - I_-)$. Aleshores calculem l'acció de I_x sobre la base $\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}$:

$$I_x|1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle \tag{57}$$

$$I_x|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle + |1,-1\rangle) \tag{58}$$

$$I_x|1,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle \tag{59}$$

Per tant, la representació de I_x en la base $\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}$ serà

$$\mathbb{I}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{60}$$

Ara cal tenir en compte que d'acord amb el criteri de Condon-Shortley $X = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle - |1,-1\rangle)$, $Y = \frac{i}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle + |1,-1\rangle)$ i $Z = |1,0\rangle$. Amb la qual cosa, la matriu M que aplicada a la base $\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}$ dóna lloc a la base $\{X,Y,Z\}$ serà

$$\mathbb{M} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ i & 0 & i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \tag{61}$$

La matriu que fa el canvi invers serà doncs

$$\mathbb{M}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & -i & 0 \end{pmatrix} \tag{62}$$

En conseqüència, $\mathbb{I}_x$ en la base $\{X,Y,Z\}$ serà:

$$\mathbb{M}\,\mathbb{I}_x\,\mathbb{M}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ i & 0 & i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & -i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \tag{63}$$

Anàlogament podem calcular les altres components i comprovar que les matrius obtingudes són idèntiques a les de Voon (pag. 82 de [1]), excepte el signe de $\mathbb{I}_x$ i $\mathbb{I}_z$ (el signe de $\mathbb{I}_y$ si que és correcte):

$$\mathbb{I}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{I}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{I}_z = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{64}$$

13 Apèndix 3: Producte directe o producte Cronecker

El producte directe o producte Cronecker de dues matrius és defineix:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} r & s \\ t & u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\begin{pmatrix} r & s \\ t & u \end{pmatrix} & b\begin{pmatrix} r & s \\ t & u \end{pmatrix} \\ c\begin{pmatrix} r & s \\ t & u \end{pmatrix} & d\begin{pmatrix} r & s \\ t & u \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ar & as & br & bs \\ at & au & bt & bu \\ cr & cs & dr & ds \\ ct & cu & dt & du \end{pmatrix} \tag{65}$$

Per exemple calculem el producte de dues matrius files $(\uparrow, \downarrow) \otimes (X, Y, Z) = (X \uparrow, Y \uparrow, Z \uparrow, X \downarrow, Y \downarrow, Z \downarrow)$. Anàlogament, el producte de dos vectors columna:

$$\begin{pmatrix} \uparrow \\ \downarrow \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X\uparrow \\ Y\uparrow \\ Z\uparrow \\ X\downarrow \\ Y\downarrow \\ Z\downarrow \end{pmatrix}$$

Aquests dos exemples és permeten comprovar una propietat del producte directe que és diferent del producte ordinari de matrius: *la transposta del producte directe de dues matrius és igual al producte directe de les transpostes:* $(M_1 \otimes M_2)^t = M_1^t \otimes M_2^t$. Noteu la diferència amb el producte ordinari: *la transposta del producte de dues matrius és igual al producte de les transpostes ordenades a l'inrevés:* $(M_1 \cdot M_2)^t = M_2^t \cdot M_1^t$.

References

[1] Lok C. Lew Yan Voon and M. Willatzen, The k·p method, Springer (2009), .

[2] P.N. Stavrinou and R. van Dalen , Phys. Rev. B 55 (1977) 15456.

[3] Mireles F and Ulloa E, 1999 *Phys. Rev. B* **60** 13659.

[4] Shun Lien Chuang, Physics of photonic devices, Wiley (2009), pag 127-129.

[5] B. Lassen, L.C. Lew Yan Voon, M. Willatzen and R. Melnik Solid State Communications 132 (2004) 141.

[6] S.-H. Park and S.-L. Chuang J. Appl. Phys. 87 (2000) 353.

[7] Luttinger J M 1956 *Phys. Rev.* **102** 1030.

[8] M. Hamermesh, Group theory and its applicationis to physical problems, Addison-Wesley (1964), Dover (1989), pag. 332.

[9] M. Weissbluth, Atoms and Molecules, Academic Press (1978), pag. 55.

[10] A. Palazzolo, Am. J. Phys. **44**, 63 (1976); Erratum, Am. J. Phys. **44**, 490 (1976)

[11] A. W. Hoshi Elements of group theory for physicists, Wiley (1984) pag 134.