g-Factor

Josep Planelles

10 de gener de 2013

1 Hamiltonià de Luttinger-Kohn en presència de camp magnètic

Com sabem, l'hamitonià de Luttinger-Kohn (també anomenat hamitonià $k \cdot p$) s'obté mitjançant una expansió pertorbacional a segon ordre en el vector d'ona $\mathbf{k}$, al voltant de l'anomentat punt Γ de la xarxa recíproca (on $\mathbf{k}$ és zero). Per tant, aquest operador ha de ser una funció quadràtica de les components $k_i\, k_j$, $i, j = x, y, z$, del vector d'ona $\mathbf{k}$ i la seua representació matricial en una base (e.g la base de valència) serà una matriu simètrica amb elements de matriu que seran proporcionals a les sis possibles parelles $k_i\, k_j$,

$$\mathbb{H} = \sum_{i \geq j}^{3} \mathbb{M}_{ij}\, k_i\, k_j \tag{1}$$

En absència de camp magnètic els productes $k_i\, k_j$ constitueixen un tensor simètric i, per tant, també ho hauran de ser les matrius $\mathbb{M}_{ij}$. En presència de camp magnètic, les components $k_i\, k_j$ ja no commuten i, per tant, l'abans esmentat tensor construït com a producte tensorial $\mathbf{k} \otimes \mathbf{k}$, passa a tenir part antisimètica. En conseqüència, les matrius $\mathbb{M}$ podran ser també antisimètriques. En altres paraules, la inclusió del camp magnètic farà apareixer nous termes en l'hamiltonià $k \cdot p$.

Considerem un camp magnètic constant de components (B_x, B_y, B_z). Aquest pot derivar del potencial vector $\mathbf{A} = -(yB_z, zB_x, xB_y)$, el qual dóna compliment al gauge de Coulomb $\nabla \mathbf{A} = 0$. Com el vector d'ona $\mathbf{k}$ és base de la representació T_2 del grup T_d del tetraedre[1] i $T_2 \otimes T_2 = A_1 \oplus E \oplus T_2 \oplus [T_1]$, la part antisimètrica d'aquest producte té simetria T_1. Acudint a les taules de caràcters, la base de T_1 està constituida per les rotacions $R_i = x_j x_k - x_k x_j$. Considerem doncs aquestes components en el cas del vector $\mathbf{k}$, que equival a considerar les conmutacions $[k_i, k_j]$.

En presència de camp magnètic $k_i = -i\hbar \frac{d}{dx_i} + A_i$, aleshores tenim que:

$$\begin{array}{rcccl}
[k_y, k_z] & = & [-i\hbar\frac{d}{dy} - zB_x, -i\hbar\frac{d}{dz} - xB_y] & = & -i\hbar B_x \\
[k_z, k_x] & = & [-i\hbar\frac{d}{dz} - xB_y, -i\hbar\frac{d}{dx} - yB_z] & = & -i\hbar B_y \\
[k_x, k_y] & = & [-i\hbar\frac{d}{dx} - yB_z, -i\hbar\frac{d}{dy} - zB_x] & = & -i\hbar B_z
\end{array} \tag{2}$$

Per tant, la base de funcions antisimètriques a considerar és $-i\hbar(B_x, B_y, B_z)$. Aquesta ha de combinar-se amb una matriu antisimètrica de la mateixa simetria per a formar un invariant. Podem triar la matriu representació del moment angular $\mathbb{L} = (L_x, L_y, L_z)$. El nou invariant que intervé en l'hamiltonià $k \cdot p$ serà doncs,

$$\mathbb{I} = \mathbb{L}_x(-i\hbar B_x) + \mathbb{L}_y(-i\hbar B_y) + \mathbb{L}_z(-i\hbar B_z) = -i\hbar \mathbb{L} \cdot \mathbf{B} \tag{3}$$

El nou terme que origina el camp magnètic en l'hamiltonià de Luttinger-Kohn és doncs $\kappa \mathbb{L} \cdot \mathbf{B}$.

Cal dir que hi ha una altra base matricial d'aquesta mateixa representació, (L_x^3, L_y^3, L_z^3), que dóna lloc a un terme adiccional $q\,(L_x^3 B_x + L_y^3 B_y + L_z^3 B_z)$, terme que sovint és rebutjable per correspondre a un

[1] En aquestes notes ens limitem a considerdar semiconductors tipus ZincBlenda.

ordre pertorbatiu superior (quarta potència). Tanmateix, cal aclarir que la teoria de grups no distingeix entre tipus de moment angular ($\mathbb{L}$, $\mathbb{S}$, $\mathbb{J}$). I aquest fet és rellevant perquè aparentment hi ha alguna cosa que hem omès: el terme Zeeman de l'hamiltonià. En efecte, l'existència de camp magnètic genera dos canvis en l'hamiltonià: el terme $\hbar\mathbf{k}$ cal canviar-lo per $(-i\hbar\nabla - e\,A)$ i, a més, cal afegir el terme Zeeman $\frac{g}{2}\mu_b\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}$, amb $\boldsymbol{\sigma} = 2\mathbf{S}$ i on, per al cas de l'electró lliure, $g = 2$. En estat sòlid però (veure per exemple Winker p.14) g pot ser anisotròpic, així (Winkler p.132) $\mathcal{H}_Z^{cond} = \frac{g_\perp}{2}\mu_b(\sigma_x B_x + \sigma_y B_y) + \frac{g_z}{2}\mu_b\sigma_z B_z$.

El terme $\mu_b\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}$ se pot sumar al terme $\mathbb{L}\cdot\mathbf{B}$ donant lloc a un terme efectiu $\kappa\mathbb{J}\cdot\mathbf{B}$, on κ és un paràmetre fenomenològic no determinable per consideracions de simetria. D'aquesta forma, podem dir que en la descripció anterior del camp magnètic en l'hamiltonia $k\cdot p$ no hem omès cap terme si escrivim $\kappa\mathbb{J}\cdot\mathbf{B}$ en lloc de $\kappa\mathbb{L}\cdot\mathbf{B}$.

En un paper recent Bree, Pryor et al. PRB 85 (2012) 165323 consideren per a l'hamiltonià $k\cdot p$ 8×8 el terme Zeeman següent:

$$\mathcal{H}_{\text{Zeeman}} = \frac{1}{2}\mu_b\mathbf{B}\cdot\begin{pmatrix} 2\boldsymbol{\sigma} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3}\mathbb{J} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3}\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \tag{4}$$

on μ_b és de nou el magnetó de Bohr i $\mathbb{J}$, $\boldsymbol{\sigma}$ són les matrius d'espín 3/2 i 1/2, respectivament. Els factors g de Landé que inclou veiem que són $g = 2$ per a la conducció, $g = 4/3$ per a la valència i $g = 2/3$ per a la banda de split-off que, com veurem tot seguit, són els *purs* factors de Landé, on s'ha exclòs la contribució de les bandes remotes al factor. Tot seguit trobarem aquests factors i després farem referència a la justificació que fa Bree de la conveniència d'excloure la contribució de les bandes remotes en l'hamiltonià corresponent a punts quàntics.

Abans però recordem breument l'origen del factor g de Landé en la física atòmica. Escrivim:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 - \boldsymbol{\mu}_S\cdot\mathbf{B} \tag{5}$$

on $\boldsymbol{\mu}_S = \frac{e}{m}\mathbf{S} = \frac{e}{2m}\boldsymbol{\sigma}$.

Si considerem un camp axial definit per $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B}\times\mathbf{r})$ i rebutgem la contribució $\frac{e^2A^2}{2m}$ obtenim:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} - e\frac{\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}}{m} - \frac{e}{m}\mathbf{S}\cdot\mathbf{B} \tag{6}$$

Si tenim en compte que $\frac{\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}}{m} = \frac{1}{2m}(\mathbf{B}\times\mathbf{r})\mathbf{p} = \frac{1}{2m}(\mathbf{r}\times\mathbf{p})\mathbf{B} = \frac{1}{2m}\mathbf{L}\cdot\mathbf{B}$ trobem

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{2m}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})\cdot\mathbf{B} \\ &= \frac{p^2}{2m} + \mu_B\, g\, J_z B_0 \end{aligned} \tag{7}$$

on definim el magnetó de Bohr $\mu_B = \frac{|e|}{2m}$. En al cas de l'electró lliure $\mathbf{L} = 0$, $\mathbf{J} = \mathbf{S}$ i $g = 2$.

En el cas de la banda de conducció també $L = 0$, per tant $\mathbf{J} = \mathbf{S}$ i la base de funcions a considerar és $\{|S\uparrow\rangle, |S\downarrow\rangle\}$. En aquesta base, la representació del moment angular total són les propies matrius $\boldsymbol{\sigma}$ de Pauli i el terme Zeeman $\frac{g}{2}\mu_b\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}$ és simplement $\mu_b\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}$, considerant que $g = 2$. En altres paraules, en el cas de conducció el moment angular total J de la funció de Bloch és el propi espín $\boldsymbol{\sigma}$ perquè $L = 0$ i no hi ha Zeeman orbital.

En el cas de la banda de valència $J = 3/2$, que deriva de l'acoblament entre $L = 1$ i $S = 1/2$, de manera que la base a considerar és $\{|3/2, M\rangle, M = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2\}$. En aquesta base trobem que

$\mathbb{L} = 2/3\ \mathbb{J}$ i també $\boldsymbol{\sigma} = 2\mathbb{S} = 2/3\ \mathbb{J}$ (veure apèndix A), de manera que la contribució a l'hamiltonià és $\mathbb{H} = \mu_B(\frac{2}{3} + \frac{2}{3})\mathbb{J}\mathbf{B} = \mu_B \frac{4}{3}\mathbb{J}\mathbf{B} = \mu_B\, g\, \mathbb{J}\mathbf{B}$. Trobem doncs que $g = 4/3$.

De manera semblant, en la base $|1/2, M\rangle$ ens fixem en que $\langle J_z\rangle = \frac{1}{2}$, $\langle L_z\rangle = \frac{2}{3}$ i $\langle \sigma_z\rangle = -\frac{1}{3}$,[2] amb la qual cosa $\mathbb{H} = \mu_B(\frac{4}{3} - \frac{2}{3})\mathbb{J}\mathbf{B} = \mu_B \frac{2}{3}\mathbb{J}\mathbf{B} = \mu_B\, g\mathbb{J}\mathbf{B}$. Trobem doncs que $g = 2/3$.

Aquests factors de Landé podrien haver-se trobat d'una manera més directa si acudim a la fórmula del factor g en termes dels nombres quàntics (veure llibre espectroscòpia apartat 6.5.3, p. 239, eq. 6.90)

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

que dóna lloc a 2, 4/3 i 2/3 per als acoblaments $(J = 1/2,\ L = 0,\ S = 1/2)$, $(J = 3/2,\ L = 1,\ S = 1/2)$ i $(J = 1/2,\ L = 1,\ S = 1/2)$ respectivament.

Una volta trobats els factors de Landé que usen Bree et al. fem una breu referència a la justificació que fan sobre la conveniència d'usar aquests factors i excloure així la contribució de les bandes remotes en el cas de punts quàntics. En un dels apèndixos del paper de Bree es justifica l'ús de $g = 2$ per a la conducció del seu hamiltonià 8×8 perquè una estimació de la contribució de les bandes remotes indica que aquesta és molt petita. En el cas de la valència observa que la contribució de les bandes remotes no és rebutjable i, en principi haurien d'incloure el paràmetre fenomenològic κ en el càlcul de volum extens (bulk). No obstant això, observen que la inclusió de κ introdueix un offset molt gran comparat amb els resultats experimentals en QDs i per això consideren la no inclusió d'aquest factor.

2 Introducció del camp magnètic a la manera JP-WJ en JPCM

En el model que vam proposar en JPCM es considera un hamiltonià de partida,

$$\mathcal{H} = \frac{(p_\perp - q\, A_\perp)^2}{2m_\perp} + \frac{(p_z - q\, A_z)^2}{2m_z} \tag{8}$$

on no hi ha inclòs el terme Zeeman.

En física atòmica, on les masses són isotròpiques, el terme Zeeman és

$$\mathcal{H}_Z = \mu_b \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \tag{9}$$

on $\mu_b = \frac{|q|}{2m}$ és el magnetó de Bohr, amb q i m la càrrega i la massa de la partícula que interacciona amb el camp.

La qüestió ara és determinar la forma de $\mathcal{H}_Z$ en el cas de massa anisotròpica. Allò que farem serà cercar una justificació de la fórmula de $\mathcal{H}$ des de primers principis i aplicarem el mateix raonament per obtenir $\mathcal{H}_Z$. Considerem doncs el cas d'una hipotètica partícula amb massa anisotròpica. Vol dir açò que l'acceleració a causada per la força $\mathbf{F}$ és diferent per a distintes orientacions. Escrivim doncs que $F_i = m_i a_i$, on $i = x, y, z$.

El treball que l'actuació de la força al llarg d'un despaçament $d\mathbf{r}$ produeix s'acumula en forma d'energia cinètica:

$$dT = \mathbf{F}\, d\mathbf{r} = \sum_i F_i dx_i = \sum_i m_i \frac{d\,\dot{x}_i}{dt} dx_i = \sum_i m_i\, \dot{x}_i\, d\,\dot{x}_i \tag{10}$$

[2] No cal calcular totes les components atès que, com hem comprovat a l'apèndix A, totes presenten el mateix factor de proporcionalitat.

per tant, l'energia cinètica serà:

$$T = \sum_i \frac{1}{2} m_i \overset{\bullet}{x}_i^2 = \sum_i \frac{\pi_i^2}{2m_i} \tag{11}$$

on $\pi_i = m_i \overset{\bullet}{x}_i$.

Si aquesta partícula presenta una càrrega q i una certa velocitat $\mathbf{v} = \overset{\bullet}{\mathbf{r}}$, i penetra un camp magnètic $\mathbf{B}$, la força a que es veu sotmesa és $\mathbf{F} = q(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$. Atès que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, on $\mathbf{A}$ és el potencial vector, la component F_x d'aquesta força és, en particular,

$$F_x = q(\mathbf{v} \times \nabla \times \mathbf{A})_x = q \left(\frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - \frac{d}{dt} A_x \right) \tag{12}$$

Si definim el potencial generalitzat $U = -q\,\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}$, atès que $\frac{\partial U}{\partial \overset{\bullet}{x}} = -q\,A_x$ tenim que:

$$F_x = -\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \overset{\bullet}{x}} \tag{13}$$

Però també,

$$F_x = \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \overset{\bullet}{x}} \tag{14}$$

Aleshores, si definim la lagrangiana $\mathcal{L} = T - U$, des de les equacions (13) i (14) obtenim l'equació de Langrange,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \overset{\bullet}{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0 \tag{15}$$

i a partir de la lagrangiana podem obtenir la hamiltoniana,

$$\mathcal{H} = \sum_i \overset{\bullet}{x}_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \overset{\bullet}{x}_i} - \mathcal{L} = T = \sum_i \frac{\pi_i^2}{2m_i} \tag{16}$$

Si tenim en compte ara la definició de moment canònic, $p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \overset{\bullet}{x}_i} = \pi_i + q\,A_i$, escrivim finalment l'hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{(p_i - q\,A_i)^2}{2m_i}, \tag{17}$$

cosa que justifica l'equació (8).

L'existència de l'espín, i per tant del terme Zeeman, s'origina en l'equació de Dirac. De manera heurística, l'operador energia cinètica que entra en l'equació de Dirac, T_D, el podem obtenir a partir de l'operador energia cinètica T que apareix en la formulació de Schrödinger efectuant la subtitució formal $\boldsymbol{\pi} \to \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}$ en $T = \frac{\pi^2}{2m}$, on $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - q\,\mathbf{A}$, tenint en compte les dues identitats següents

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \tag{18}$$

$$\mathbf{p} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{p} = -i\hbar \nabla \times \mathbf{A} = -i\hbar \mathbf{B} \tag{19}$$

on $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ són dos vectors qualsevol i $\mathbf{B}$ és el camp magnètic. Aquesta subtitució formal ens fa passar des de $T = \frac{\pi^2}{2m}$ fins a $T_D = \frac{(\mathbf{p} - q\,\mathbf{A})^2}{2m} - \frac{q\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$.

En el cas que $T = \sum_i \frac{\pi_i^2}{2m_i}$, aleshores caldria considerar que:

$$T_D = \frac{1}{2}\left(\sum_i \frac{\sigma_i \pi_i}{m_i}\right)\left(\sum_j \frac{\sigma_j \pi_j}{m_j}\right) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\overline{\boldsymbol{\pi}})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\overline{\boldsymbol{\pi}}) = \frac{1}{2}\overline{\pi}^2 + \frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\overline{\boldsymbol{\pi}}\times\overline{\boldsymbol{\pi}} \tag{20}$$

on $\overline{\pi}_i = \frac{\pi_i}{\sqrt{m_i}}$.

Desenvolupant el producte mixt que apareix en l'equació (20) tenim que

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\overline{\boldsymbol{\pi}}\times\overline{\boldsymbol{\pi}} = \sigma_x \frac{1}{\sqrt{m_y m_z}}[\pi_y, \pi_z] + \sigma_y \frac{1}{\sqrt{m_x m_z}}[\pi_z, \pi_x] + \sigma_z \frac{1}{\sqrt{m_x m_y}}[\pi_x, \pi_y] \tag{21}$$

on $[\pi_i, \pi_j] = \pi_i \pi_j - \pi_j \pi_i$.

Si definim $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$ de components $\frac{\sigma_i}{\sqrt{m_j\, m_k}}$, on i, j, k representen qualsevol permutació de la terna x, y, x, podem escriure que:

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\overline{\boldsymbol{\pi}}\times\overline{\boldsymbol{\pi}} = \overline{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\pi}). \tag{22}$$

A més, com que $\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\pi} = (\mathbf{p} - q\mathbf{A})\times(\mathbf{p} - q\mathbf{A}) = -q(\mathbf{p}\times\mathbf{A} + \mathbf{A}\times\mathbf{p}) = i\, q\, \hbar \nabla \times A = i\, q\, \hbar\, \mathbf{B}$ trobem que

$$\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\overline{\boldsymbol{\pi}}\times\overline{\boldsymbol{\pi}} = -\frac{q\hbar}{2}\,\overline{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{B}, \tag{23}$$

que, en el cas particular $\mathbf{B} = B_0\,\mathbf{k}$, $m_x = m_y = m_\perp$ dóna lloc a

$$-\frac{q\hbar}{2m_\perp}\sigma_z\, B_0 \tag{24}$$

Per tant, l'hamiltonià complet en presència de camp magnètic axial resulta:

$$\mathcal{H} = \frac{(p_\perp - q\, A_\perp)^2}{2m_\perp} + \frac{(p_z - q\, A_z)^2}{2m_z} - \frac{q\hbar}{2m_\perp}\sigma_z\, B_0 \tag{25}$$

D'ara en avant considerarem que $\mathbf{B} = B_0\mathbf{k}$ i simetria axial.

Si el sistema presenta simetria axial i massa depenent de la posició, l'operador d'energia cinètica a considerar és:

$$\mathcal{T} = (p_\perp - q\, A_\perp)\frac{1}{2m_\perp}(p_\perp - q\, A_\perp) + (p_z - q\, A_z)\frac{1}{2m_z}(p_z - q\, A_z) \tag{26}$$

Si assumim camp magnètic axial uniform i considerem el gauge simètric $\mathbf{A} = \frac{B_0}{2}\,[-y, x, 0]$, tenim que $A_z = 0$. Per tant, la component z de l'energia cinètica no es veu afectada pel camp, $\mathcal{T}_z = p_z \frac{1}{2m_z}\, p_z$, mentre que la component *in-plane* resulta:

$$\mathcal{T}_\perp = p_\perp\, \frac{1}{2m_\perp}\, p_\perp + \frac{q^2 A_\perp^2}{2m_\perp} - \frac{qA_\perp}{2m_\perp}\cdot p_\perp - \frac{q}{2}p_\perp \cdot \frac{A_\perp}{m_\perp} \tag{27}$$

Ara be, en cas de simetria axial, $m_\perp(\rho, z)$, tenim que:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{m_\perp(\rho, z)}\right) = \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\frac{1}{m_\perp(\rho, z)}\right) = \frac{x}{\rho}\,\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\frac{1}{m_\perp(\rho, z)}\right)$$

Anàlogament, $\frac{\partial}{\partial y}(\frac{1}{m_\perp}) = \frac{y}{\rho}\,\frac{\partial}{\partial \rho}(\frac{1}{m_\perp})$, i per tant,

$$p_\perp\left(\frac{1}{m_\perp}\right) = -\frac{i\,\hbar}{\rho}[x, y, 0]\,\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\frac{1}{m_\perp}\right) \tag{28}$$

Aleshores,

$$p_\perp \cdot \frac{A_\perp}{m_\perp}\,\Psi = \sum_{x,y} p_i\,(\frac{A_i\,\Psi}{m_\perp}) = \sum_{x,y}\left\{\frac{\Psi}{m_\perp}\,p_i(A_i) + \frac{A_i}{m_\perp}\,p_i(\Psi) + A_i\,\Psi\,p_i(\frac{1}{m_\perp})\right\} \tag{29}$$

Ara be, $p_i(A_i) = 0$ i $\sum_{x,y} A_i\,p_i(\frac{1}{m_\perp}) = \frac{B_0}{2}[-y,x]\,\frac{-i\hbar}{\rho}[\begin{matrix} x \\ y \end{matrix}]\frac{\partial}{\partial\rho}(\frac{1}{m_\perp}) = 0$, amb la qual cosa,

$$p_\perp \cdot \frac{A_\perp}{m_\perp}\,\Psi = \frac{A_\perp}{m_\perp} \cdot p_\perp\,\Psi, \tag{30}$$

de manera que el terme d'energia cinètica queda semblant al cas en que la massa és constant:

$$\mathcal{T}_\perp = p_\perp\,\frac{1}{2m_\perp}\,p_\perp + \frac{q^2 A_\perp^2}{2m_\perp} - \frac{q}{m_\perp}\,A_\perp \cdot p_\perp \tag{31}$$

Atès que $p_\perp = -i\,\hbar\nabla_\perp$ i $A_\perp = \frac{B_0}{2}\,[-y,x]$ trobem que:

$$\mathcal{T}_\perp = -\hbar^2\nabla_\perp\,\frac{1}{2m_\perp}\,\nabla_\perp + \frac{q^2 B_0^2\rho^2}{8m_\perp} - \frac{q\,B_0}{2m_\perp}\,(x\,\hat{p}_y - y\hat{p}_x) \tag{32}$$

on $(x\,\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = \hat{L}_z$. I l'hamiltonià complet, eq. (25) queda, en a.u.,

$$\mathcal{H} = -\nabla\,\frac{1}{2m_\perp}\,\nabla + \frac{q^2 B_0^2\rho^2}{8m_\perp} - \frac{q\,B_0}{2m_\perp}\,\hat{L}_z - \frac{q\,B_0}{2m_\perp}\,\sigma_z \tag{33}$$

que particularitzat a electrons ($m_\perp > 0$, $q = -1$) queda

$$\mathcal{H}_e = -\nabla\,\frac{1}{2m_\perp}\,\nabla + \frac{B_0^2\rho^2}{8m_\perp} + \frac{B_0}{2m_\perp}\,(\hat{L}_z + \sigma_z) \tag{34}$$

i per a forats ($m_\perp = -|m_\perp| < 0$, $q = 1$) queda

$$\mathcal{H}_h = \nabla\,\frac{1}{2|m_\perp|}\,\nabla - \frac{B_0^2\rho^2}{8|m_\perp|} + \frac{B_0}{2|m_\perp|}\,(\hat{L}_z + \sigma_z) \tag{35}$$

La presència de camp origina canvis en l'hamiltonià $\mathcal{H}^0$ que descriu el sistema a camp magnètic zero: $\mathcal{H}_\perp = \mathcal{H}_\perp^0 - \frac{qB_0}{2m_\perp}\hat{L}_z + \frac{q^2B_0^2\rho^2}{8m_\perp}$, $\mathcal{H}_z = \mathcal{H}_z^0$ i apareix $\mathcal{H}_Z = -\frac{qB_0}{2m_\perp}\hat{\sigma}_z$.

Recordem que l'actuació de l'operador $\mathcal{H}$ sobre la funció total $|\Psi\rangle$, producte de la part envolupant $|f\rangle$ per la part de Bloch $|JM\rangle$, $|\Psi\rangle = |f\rangle|JM\rangle$, resulta: $\mathcal{H}|f\rangle|JM\rangle = |JM\rangle\mathcal{H}|f\rangle + |f\rangle\mathcal{H}|JM\rangle$. Per tant, obtenim els elements de matriu:

$$\begin{aligned} \langle J'M'|\mathcal{H}|\Psi\rangle &= \delta_{JJ'}\,\delta_{MM'}\,\mathcal{H}|f\rangle + \langle J'M'|\mathcal{H}|JM\rangle|f\rangle \\ &= (\langle J'M'|\mathcal{H}|JM\rangle + \delta_{JJ'}\,\delta_{MM'}\,\mathcal{H})\,|f\rangle \end{aligned} \tag{36}$$

Aleshores, a partir de l'hamiltonià $\mathcal{H}$ que actual sobre la funció total $|\Psi\rangle$, obtenim l'operador $(\mathcal{H}\cdot\mathbb{I}+\mathbb{M})$, on $\mathbb{M}_{ij} = \langle J_iM_i|\mathcal{H}|J_jM_j\rangle$, que actua sobre l'envolupant $|f\rangle$. Els termes que cal afegir a $\mathbb{M}$ com a conseqüència de la inclusió del camp magnètic són un terme diagonal $\frac{B_0^2\rho^2}{8m_\perp}$, on $m_\perp$ val $-\frac{1}{\gamma_1+\gamma_2}$ en $\mathbb{M}_{11}$ i $\mathbb{M}_{44}$ (i representa la massa perpendicular del heavy hole $m_\perp^{HH}$), val $-\frac{1}{\gamma_1-\gamma_2}$ en $\mathbb{M}_{22}$ i $\mathbb{M}_{33}$ ($m_\perp^{LH}$) i finalment val $-1/\gamma_1$ en $\mathbb{M}_{55}$ i $\mathbb{M}_{66}$ ($m_\perp^{SO}$), més una altra matriu que inclou els termes que s'originen en actuar $\hat{L}_z$ i σ_z sobre la funció de Bloch.

Si considerem la base de valencia més la de split-off, i tenim en compte les fases i factors de normalització discutits en l'apèndix A, podem calcular les contribucions $\mathbb{L}_z$, σ_z dels operadors $\hat{L}_z$ i $\hat{\sigma}_z$ (veure apèndix B).

Per tant, la contribució $\langle J_i M_i | \frac{-qB_0}{2m_\perp} \hat{L}_z + \frac{-qB_0}{2m_\perp} \hat{\sigma}_z | J_j M_j \rangle$ als elements de matriu $\mathbb{M}_{ij}$ que actua sobre la funció envolupant resulta ser per a forats ($q = 1$, $m_\perp = -|m_\perp| < 0$):

$$\frac{B_0}{2|m_\perp|} \left(\mathbb{L}_z + \sigma_z \right). \tag{37}$$

Formalment $\mathbb{L}_z + \sigma_z = \mathbb{L}_z + 2\mathbb{S}_z = g\ \mathbb{J}_z$ on, de manera semblant a Bree tenim que $g = 4/3$ per a la valència i $g = 2/3$ per a la banda de split-off.

Explicitem alguns dels elements d'aquesta matriu. Abans però explicitem les masses efectives perpendiculars implicades en els diferents elements de matriu. Els factors massics els podem consultar en l'apèndix de C. Segarra, J.I. Climente and J. Planelles J.Phys.:Condens.Matter 24 (2012) 115801. Aquests són:

$$\begin{array}{llll} \mathbb{M}_{11}: & m_\perp = -\frac{1}{\gamma_1+\gamma_2} & \mathbb{M}_{22}: & m_\perp = -\frac{1}{\gamma_1-\gamma_2} \\ \mathbb{M}_{44}: & m_\perp = -\frac{1}{\gamma_1+\gamma_2} & \mathbb{M}_{33}: & m_\perp = -\frac{1}{\gamma_1-\gamma_2} \\ \mathbb{M}_{55}: & m_\perp = -\frac{1}{\gamma_1} & \mathbb{M}_{66}: & m_\perp = -\frac{1}{\gamma_1} \\ \mathbb{M}_{25}: & m_\perp = -\frac{1}{\sqrt{2}\,\gamma_2} & \mathbb{M}_{52}: & m_\perp = -\frac{1}{\sqrt{2}\,\gamma_2} \\ \mathbb{M}_{36}: & m_\perp = -\frac{1}{\sqrt{2}\,\gamma_2} & \mathbb{M}_{63}: & m_\perp = -\frac{1}{\sqrt{2}\,\gamma_2} \end{array} \tag{38}$$

En conseqüència, els elements no nuls d'aquesta matriu resulten ser:

$$\begin{array}{lcl} \mathbb{M}_{11} & = & B_0 \frac{\gamma_1+\gamma_2}{2} \cdot 2 = (\gamma_1+\gamma_2)\, B_0 \\ \mathbb{M}_{22} & = & B_0 \frac{\gamma_1-\gamma_2}{2} \cdot \frac{2}{3} = \frac{\gamma_1-\gamma_2}{3}\, B_0 \\ \mathbb{M}_{33} & = & -\mathbb{M}_{22} = -\frac{\gamma_1-\gamma_2}{3}\, B_0 \\ \mathbb{M}_{44} & = & -\mathbb{M}_{11} = -(\gamma_1+\gamma_2)\, B_0 \\ \mathbb{M}_{55} & = & B_0 \frac{\gamma_1}{2} \cdot \frac{1}{3} = \frac{\gamma_1}{6}\, B_0 \\ \mathbb{M}_{66} & = & -\mathbb{M}_{55} = -\frac{\gamma_1}{6}\, B_0 \\ \mathbb{M}_{25} & = & B_0 \frac{\sqrt{2}\,\gamma_2}{2} (-\frac{\sqrt{2}}{3}) = -\frac{\gamma_2}{3}\, B_0 \\ \mathbb{M}_{52} & = & \mathbb{M}_{25} = -\frac{\gamma_2}{3}\, B_0 \\ \mathbb{M}_{36} & = & B_0 \frac{\sqrt{2}\,\gamma_2}{2} (\frac{\sqrt{2}}{3}) = \frac{\gamma_2}{3}\, B_0 \\ \mathbb{M}_{36} & = & \mathbb{M}_{63} = \frac{\gamma_2}{3}\, B_0 \end{array} \tag{39}$$

Per al cas de 4 bandes la contribució del camp magnètic resulta:

$$|3/2, 3/2\rangle : \quad -(\gamma_1+\gamma_2)\left[\frac{B_0^2\rho^2}{8} + \frac{B_0}{2}(F_z - 3/2)\right] + \mathbb{M}_{11} = -(\gamma_1+\gamma_2)\left[\frac{B_0^2\rho^2}{8} + \frac{F_z - 7/2}{2} B_0\right] \tag{40}$$

$$|3/2, 1/2\rangle : \quad -(\gamma_1-\gamma_2)\left[\frac{B_0^2\rho^2}{8} + \frac{B_0}{2}(F_z - 1/2)\right] + \mathbb{M}_{22} = -(\gamma_1-\gamma_2)\left[\frac{B_0^2\rho^2}{8} + \frac{F_z - 7/6}{2} B_0\right] \tag{41}$$

$$|3/2, -1/2\rangle : \quad -(\gamma_1-\gamma_2)\left[\frac{B_0^2\rho^2}{8} + \frac{B_0}{2}(F_z + 1/2)\right] + \mathbb{M}_{33} = -(\gamma_1-\gamma_2)\left[\frac{B_0^2\rho^2}{8} + \frac{F_z + 7/6}{2} B_0\right] \tag{42}$$

$$|3/2, -3/2\rangle : \quad -(\gamma_1+\gamma_2)\left[\frac{B_0^2\rho^2}{8} + \frac{B_0}{2}(F_z + 3/2)\right] + \mathbb{M}_{44} = -(\gamma_1+\gamma_2)\left[\frac{B_0^2\rho^2}{8} + \frac{F_z + 7/2}{2} B_0\right] \tag{43}$$

3 Sobre el signe del terme lineal

Tot i que els raonaments anteriors semblen correctes hi ha un resultat que evidencia una manca de simetria entre electrons i forats. Si comparem les equacions (34) i (35) trobem que mentre que, en el cas d'electrons, el terme lineal amb el camp se suma al terme quadràtic, en el cas de forats se resta. Aquest resultat és (almenys per a mi) insatisfàctori. Tot seguit assatge un possible raonament i demostració subsegüent que restableix la simetria.

En el cas d'electrons, en que la massa és positiva, l'operador moment lineal té direcció contrària a l'operador nabla: $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$. Podríem pensar que en el cas de forats, en que la massa és negativa, l'operador moment i l'operador nabla tenen la mateixa direcció, és a dir: $\mathbf{p} = i\hbar\nabla$. Sota aquesta hipòtesi, l'equació (19) canviaria el signe i passaria a ser:

$$\mathbf{p} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{p} = i\hbar\nabla \times \mathbf{A} = i\hbar\mathbf{B} \tag{44}$$

i, en conseqüència, l'energia cinètica $T = \frac{\pi^2}{2m}$ passaria a ser, en presència de camp magnètic, $T_D = \frac{\pi^2}{2m} + \frac{q\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$. Tanmateix, aquest canvi de signe en la definició de l'operador moment lineal comporta que $L_z = (xp_y - yp_x) = i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$. És a dir, que també l'operador moment angular canvie el signe, com per coherència havia de ser.

Amb tot açò, l'equació (35) per a forats quedaria :

$$\mathcal{H}_h = \nabla \frac{1}{2|m_\perp|} \nabla - \frac{B_0^2\rho^2}{8|m_\perp|} + \frac{B_0}{2|m_\perp|} (\hat{L}_z - \sigma_z) \tag{45}$$

Aquest resultat que a primera vista sembla alarmant, des del punt de vista de la simetria, no ho és. En efecte, si fem actuar $L_z = +i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$ sobre les funcions de forats de l'apèndix A obtenim un canvi de signe en la representació matricial $\mathbb{L}_z$, cosa que conjuntament dóna lloc a un canvi de signe en l'equació (37), que passa a ser

$$-\frac{B_0}{2|m_\perp|} (\mathbb{L}_z + \sigma_z) . \tag{46}$$

amb la qual cosa, el terme lineal i el quadràtic en l'equació per a forats (35) passarien a tenir el mateix signe:

$$\mathcal{H}_h = \nabla \frac{1}{2|m_\perp|} \nabla - \frac{B_0^2\rho^2}{8|m_\perp|} - \frac{B_0}{2|m_\perp|} (\mathbb{L}_z + \sigma_z) \tag{47}$$

i per al cas de 4 bandes la contribució del camp magnètic resulta:

$$|3/2, 3/2\rangle : \quad -(\gamma_1 + \gamma_2) \left[\tfrac{B_0^2\rho^2}{8} + \tfrac{B_0}{2}(F_z - 3/2)\right] - \mathbb{M}_{11} = -(\gamma_1 + \gamma_2) \left[\tfrac{B_0^2\rho^2}{8} + \tfrac{F_z+1/2}{2}B_0\right] \tag{48}$$

$$|3/2, 1/2\rangle : \quad -(\gamma_1 - \gamma_2) \left[\tfrac{B_0^2\rho^2}{8} + \tfrac{B_0}{2}(F_z - 1/2)\right] - \mathbb{M}_{22} = -(\gamma_1 - \gamma_2) \left[\tfrac{B_0^2\rho^2}{8} + \tfrac{F_z+1/6}{2}B_0\right] \tag{49}$$

$$|3/2, -1/2\rangle : \quad -(\gamma_1 - \gamma_2) \left[\tfrac{B_0^2\rho^2}{8} + \tfrac{B_0}{2}(F_z + 1/2)\right] - \mathbb{M}_{33} = -(\gamma_1 - \gamma_2) \left[\tfrac{B_0^2\rho^2}{8} + \tfrac{F_z-1/6}{2}B_0\right] \tag{50}$$

$$|3/2, -3/2\rangle : \quad -(\gamma_1 + \gamma_2) \left[\tfrac{B_0^2\rho^2}{8} + \tfrac{B_0}{2}(F_z + 3/2)\right] - \mathbb{M}_{44} = -(\gamma_1 + \gamma_2) \left[\tfrac{B_0^2\rho^2}{8} + \tfrac{F_z-1/2}{2}B_0\right] \tag{51}$$

4 Apèndix A

La base de valència és,

$$\begin{aligned}
|3/2,3/2\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}|X+iY\rangle|\uparrow\rangle \\
|3/2,1/2\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{6}}|X+iY\rangle|\downarrow\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}|Z\rangle|\uparrow\rangle \\
|3/2,-1/2\rangle &= -\tfrac{1}{\sqrt{6}}|X-iY\rangle|\uparrow\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}|Z\rangle|\downarrow\rangle \\
|3/2,-3/2\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}|X-iY\rangle|\downarrow\rangle
\end{aligned} \tag{52}$$

Cal però fer dos aclariments importants respecte de normalitzacions i fases. La primera és que $|X \pm iY\rangle$ no està normalitzat. Cal afegir una constant $1/\sqrt{2}$. Aleshores escrivim $|Y_{10}\rangle \equiv |Z\rangle$, $|Y_{11}\rangle \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}}|X+iY\rangle$, $|Y_{1,-1}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}|X-iY\rangle$. Fixem-nos en la fase que hem introduit en la definició de Y_{11}. Aquesta és consistent amb el criteri de Condon-Shortley $Y_{1\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$.

Ara ja estem en condicions de calcular la representació dels moments angular en la base $\{|3/2,3/2\rangle$, $|3/2,1/2\rangle$, $|3/2,-1/2\rangle$, $|3/2,-3/2\rangle\}$. En particular, calculem $\mathbf{J}$ fent ús d'operador de creació/aniquilació $\hat{J}_\pm$. Els resultats que obtenim són:

$$\begin{aligned}
\mathbb{J}_x &= \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & 0 \end{bmatrix} \\
\mathbb{J}_y &= \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ i\sqrt{3}/2 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & i\sqrt{3}/2 & 0 \end{bmatrix} \\
\mathbb{J}_z &= \begin{bmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{53}$$

Calculem ara la representació del moment angular $\mathbf{L}$ en aquesta mateixa la base. En el cas L_z, atès que $\langle \ell m|\hat{L}_z|\ell m'\rangle = m\,\delta(m-m')$, és immediat trobar que :

$$\mathbb{L}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{54}$$

Comprovem doncs que $\mathbb{L}_z = 2/3\,\mathbb{J}_z$.

En el cas $\hat{L}_x$, tenint en compte que $\langle \ell m|\hat{L}_\pm|\ell m\pm1\rangle = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm1)}$, i per tant, $\langle \ell m|\hat{L}_x|\ell m\pm1\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm1)}$, tenim:

$$\mathbb{L}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1/\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 1/\sqrt{3} & 0 & 2/3 & 0 \\ 0 & 2/3 & 0 & 1/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{3} & 0 \end{bmatrix} \tag{55}$$

Comprovem també que $\mathbb{L}_x = 2/3\ \mathbb{J}_x$. De manera semblant calculem $\mathbb{L}_y$, $\mathbb{S}_x$, $\mathbb{S}_y$ i $\mathbb{S}_z$ i conjuntament comprovem que $\mathbb{L} = 2/3\ \mathbb{J}$ i també $\boldsymbol{\sigma} = 2\mathbb{S} = 2/3\ \mathbb{J}$.

5 Apèndix B

En la notació d'harmònics esfèrics (veure apèndix A), la base de valència més split-off l'escrivim

$$\begin{aligned}
|3/2, 3/2\rangle &= -|Y_+ \uparrow\rangle \\
|3/2, 1/2\rangle &= -\tfrac{1}{\sqrt{3}}|Y_+ \downarrow\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |Y_0 \uparrow\rangle \\
|3/2, -1/2\rangle &= -\tfrac{1}{\sqrt{3}}|Y_- \uparrow\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |Y_0 \downarrow\rangle \\
|3/2, -3/2\rangle &= |Y_- \downarrow\rangle \\
|1/2, 1/2\rangle &= -\sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |Y_+ \downarrow\rangle + \tfrac{1}{\sqrt{3}}\ |Y_0 \uparrow\rangle \\
|1/2, -1/2\rangle &= -\sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |Y_- \uparrow\rangle + \tfrac{1}{\sqrt{3}}\ |Y_0 \downarrow\rangle
\end{aligned} \tag{56}$$

L'aplicació de l'operador $\hat{L}_z$ sobre aquesta base dóna lloc a:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z\ |3/2, 3/2\rangle &= -|Y_+ \uparrow\rangle \\
\hat{L}_z\ |3/2, 1/2\rangle &= -\tfrac{1}{\sqrt{3}}|Y_+ \downarrow\rangle \\
\hat{L}_z\ |3/2, -1/2\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{3}}|Y_- \uparrow\rangle \\
\hat{L}_z\ |3/2, -3/2\rangle &= -|Y_- \downarrow\rangle \\
\hat{L}_z\ |1/2, 1/2\rangle &= -\sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |Y_+ \downarrow\rangle \\
\hat{L}_z\ |1/2, -1/2\rangle &= \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |Y_- \uparrow\rangle
\end{aligned} \tag{57}$$

Mentre que l'aplicació de l'operador $\hat{\sigma}_z$ sobre aquesta base dóna lloc a:

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}_z\ |3/2, 3/2\rangle &= -|Y_+ \uparrow\rangle \\
\hat{\sigma}_z\ |3/2, 1/2\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{3}}|Y_+ \downarrow\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |Y_0 \uparrow\rangle \\
\hat{\sigma}_z\ |3/2, -1/2\rangle &= -\tfrac{1}{\sqrt{3}}|Y_- \uparrow\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |Y_0 \downarrow\rangle \\
\hat{\sigma}_z\ |3/2, -3/2\rangle &= -|Y_- \downarrow\rangle \\
\hat{\sigma}_z\ |1/2, 1/2\rangle &= \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |Y_+ \downarrow\rangle + \tfrac{1}{\sqrt{3}}\ |Y_0 \uparrow\rangle \\
\hat{\sigma}_z\ |1/2, -1/2\rangle &= -\sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |Y_- \uparrow\rangle - \tfrac{1}{\sqrt{3}}\ |Y_0 \downarrow\rangle
\end{aligned} \tag{58}$$

amb la qual cosa trobem:

$$\mathbb{L}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 & 0 & \sqrt{2}/3 & 0 \\ 0 & 0 & -1/3 & 0 & 0 & -\sqrt{2}/3 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}/3 & 0 & 0 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}/3 & 0 & 0 & -2/3 \end{bmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 & 0 & -2\sqrt{2}/3 & 0 \\ 0 & 0 & -1/3 & 0 & 0 & 2\sqrt{2}/3 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -2\sqrt{2}/3 & 0 & 0 & -1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 2\sqrt{2}/3 & 0 & 0 & 1/3 \end{bmatrix} \tag{59}$$

$$\mathbb{L}_z + \sigma_z = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2/3 & 0 & 0 & -\sqrt{2}/3 & 0 \\ 0 & 0 & -2/3 & 0 & 0 & \sqrt{2}/3 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}/3 & 0 & 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}/3 & 0 & 0 & -1/3 \end{bmatrix} \tag{60}$$