g-Factor (cont.): el cas de la wurtzita

Josep Planelles

23 de desembre de 2015

1 Resum d'idees bàsiques en els apunts g-factor (01/01/2013)

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

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

on $\boldsymbol{\mu}_S = \frac{e}{m}\mathbf{S} = \frac{e}{2m}\boldsymbol{\sigma}$ i considerem un camp axial definit per $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})$, a la vegada que rebutgem la contribució $\frac{e^2 A^2}{2m}$ i tenim en compte que $\frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}}{m} = \frac{1}{2m}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})\mathbf{p} = \frac{1}{2m}(\mathbf{r} \times \mathbf{p})\mathbf{B} = \frac{1}{2m}\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$. Aleshores trobem:

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

on definim el magnetó de Bohr $\mu_B = \frac{|e|}{2m}$.

En el cas dels forats de la banda de valència de Zinc Blenda tenim $J = 3/2$, que deriva de l'acoblament entre $L = 1$ i $S = 1/2$, mentre que la banda de split-off $J = 1/2$ (també resultat de l'acoblament $L = 1$ i $S = 1/2$). En els esmentat apunts, fent ús d'aquesta base es va demostrar en el seu apèndix A que $\mathbb{L}_x = 2/3\ \mathbb{J}_x$ i que $\boldsymbol{\sigma}_x = 2\mathbb{S}_x = 2/3\ \mathbb{J}_x$ (veure la relació d'aquesta base amb el harmònics esfèrics i les funcions up/down d'espín en l'eq. 56 i la demostració a l'esmentat apèndix). De manera anàloga podem trobar relacions iguals per a les altres dues components y i z, de manera que $\mathbb{L} + 2\mathbb{S} = 4/3\ \mathbb{J}$ i, per tant, $g = 4/3$.

Per completar el que allí demostrarem considerem ara la base split-off:

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

que juntament amb la relacions (d'acord amb el criteri de Condon-Shortley) $Y_{11} = -\frac{1}{\sqrt{2}}|(X + iY)\rangle$, $Y_{1,-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}|(X - iY)\rangle$ i $Y_{10} = |Z\rangle$, permet escriure:

$$\begin{aligned} |1/2, 1/2\rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{11}\downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}\uparrow \\ |1/2, -1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,-1}\uparrow - \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}\downarrow \end{aligned} \tag{4}$$

cosa que juntament amb $\langle jm|\hat{J}_x|jm{\pm}1\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}$, i.e., $\langle 1m|\hat{L}_x|1m{\pm}1\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{2 - m(m \pm 1)}$, $\langle 1/2m|\hat{S}_x|1/2m \pm 1\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{3/4 - m(m \pm 1)}$, permet calcular:

$$\mathbb{L}_x = \begin{bmatrix} 0 & 2/3 \\ 2/3 & 0 \end{bmatrix}; \ \mathbb{S}_x = \begin{bmatrix} 0 & -1/6 \\ -1/6 & 0 \end{bmatrix}; \ \mathbb{J}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{bmatrix}; \tag{5}$$

d'on concloem que $\mathbb{L}_x + 2\mathbb{S}_x = 2/3\ \mathbb{J}_x$. De manera anàloga podem trobar relacions iguals per a les altres dues components y i z, de manera que $\mathbb{L} + 2\mathbb{S} = 2/3\ \mathbb{J}$ i, per tant, $g = 2/3$ per a la banda de split-off.

2 El cas de la wurtzita

La base de funcions de Bloch per a la WZ, a diferència de la de ZnBl que és pròpia de $\widehat{J^2}$ i $\hat{J}_z$, únicament és pròpia de $\hat{J}_z$. Per tant, en WZ, la longitud del moment angular total no és coneguda i, aleshores, no té sentit relacionar-la matemàticament amb el moment magnètic. De fet, la base de WZ,

$$\begin{array}{lclcl} |u_1(3/2)\rangle & = & -\frac{1}{\sqrt{2}}|(X+iY)\uparrow\rangle & = & Y_{11}\uparrow \\ |u_2(-1/2)\rangle & = & \frac{1}{\sqrt{2}}|(X-iY)\uparrow\rangle & = & Y_{1,-1}\uparrow \\ |u_3(1/2)\rangle & = & |Z\uparrow\rangle & = & Y_{10}\uparrow \\ |u_4(-3/2)\rangle & = & \frac{1}{\sqrt{2}}|(X-iY)\downarrow\rangle & = & Y_{1,-1}\downarrow \\ |u_5(1/2)\rangle & = & -\frac{1}{\sqrt{2}}|(X+iY)\downarrow\rangle & = & Y_{11}\downarrow \\ |u_6(-1/2)\rangle & = & |Z\downarrow\rangle & = & Y_{10}\downarrow \end{array} \tag{6}$$

permet comprovar que $\mathbb{L}_z$, $\mathbb{S}_z$ i $\mathbb{J}_z$ són tots tres diagonals però que $\mathbb{L}_z + 2\mathbb{S}_z$ no és proporcional a $\mathbb{J}_z$ (perquè u_2, u_3, u_5, u_6 són mescles de funcions amb diferent valor de J i, per tant, amb diferent g, i.e., diferent factor de proporcionalitat entre $\mathbb{L} + 2\mathbb{S}$ i $\mathbb{J}$). En efecte trobem, en particular, que: $\mathbb{L}_z = diag\{1, -1, 0, -1, 1, 0\}$, $\mathbb{S}_z = diag\{1, 1, 1, -1, -1, -1\}$ i $\mathbb{J}_z = diag\{3/2, -1/2, 1/2, -3/2, 1/2, -1/2\}$. Per tant, $(\mathbb{L}_z + 2\mathbb{S}_z)$ i $\mathbb{J}_z$ no són proporcionals. Anàlogament, tampoc trobem proporcionalitat en les altres components.

Ara be, si estem interessants en termes diagonals (valors expectació) podem adonar-nos que les funcions amb J no definit són combinació lineal d'altres que si que tenen el J ben definit. Per exemple tenim que $|u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|3/2, -1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1/2, -1/2\rangle$. Per tant, podem pensar en que $|u_2\rangle$ té un proporció 1/3 de $J = 3/2$ (amb un factor $g = 4/3$) i una proporció 2/3 de $J = 1/2$ (amb un factor $g = 2/3$), cosa que ens proporciona una $g_{eff} = \frac{1}{3}\frac{4}{3} + \frac{2}{3}\frac{2}{3} = \frac{8}{9}$. En altres paraules, podem assignar uns g_{eff} per a cadascuna de les funcions. Trobem doncs que:

$$\begin{array}{lclcl} \kappa_1 & = & \kappa_4 & = & 4/3 \\ \kappa_2 & = & \kappa_5 & = & 8/9 \\ \kappa_3 & = & \kappa_6 & = & 10/9 \end{array} \tag{7}$$