Magnetic field in Polytypes

Josep Planelles

January 18, 2016

1 Hamiltonians ZB [111] vs. WZ [0001]

En el apunts sobre polytypes de 9 de juliol de 2015 vam mostrar que els Hamiltonians WZ i ZB presenten la mateixa representació matricial en la base de funcions de Bloch,[1]

$$\begin{array}{ll} |u_1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|(X+i\,Y)\uparrow\rangle & |u_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|(X-i\,Y)\downarrow\rangle \\ |u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|(X-i\,Y)\uparrow\rangle & |u_5\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|(X+i\,Y)\downarrow\rangle \\ |u_3\rangle = |Z\uparrow\rangle & |u_6\rangle = |Z\downarrow\rangle \end{array} \tag{1}$$

si fem que els paràmetres de ZB siguen:

$$\begin{array}{l} \Delta_1 = 0 \\ \Delta_2 = \Delta_3 = \Delta_{SOC}/3 \\ A_1 = -\gamma_1 - 4\gamma 3 \\ A_2 = -\gamma_1 + 2\gamma 3 \\ A_3 = 6\gamma_3 \\ A_4 = -3\gamma_3 \\ A_5 = -\gamma_2 - 2\gamma_3 \\ A_6 = -\sqrt{2}\,(2\gamma_2 + \gamma_3) \end{array} \tag{2}$$

I, a més, afegim un terme associat amb el paràmetre extra $A_z = \gamma_2 - \gamma_3$ (el qual seria zero en la WZ) en els elements de matriu H i K de manera que:

$$\Delta K_{ZB} = 2\sqrt{2} A_z k_- k_z \;\; ; \quad \Delta H_{ZB} = A_z k_-^2 \tag{3}$$

En realitat l'Hamiltonià ha de ser de massa variable. Per tant,

$$\begin{bmatrix} F-\rho & \kappa & \xi^* & 0 & 0 & 0 \\ \kappa^* & G+\rho & -\xi & 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 \\ \eta & -\eta^* & \lambda & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F+\rho & \kappa^* & -\xi \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & \kappa & G-\rho & \xi^* \\ 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & 0 & -\eta^* & \eta & \lambda \end{bmatrix} \tag{4}$$

$$
\begin{aligned}
F &= \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta && (5)\\
G &= \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta && (6)\\
\lambda &= -\frac{\Delta'}{3} + \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\left[k_z A_1 k_z + k_x A_2 k_x + k_y A_2 k_y\right] && (7)\\
\theta &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\left[k_z A_3 k_z + k_x A_4 k_x + k_y A_4 k_y\right] && (8)\\
\kappa &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\left[-k_x A_5 k_x + k_y A_5 k_y + i\,(k_x A_5 k_y + k_y A_5 k_x)\right] + \Delta\kappa && (9)\\
\eta &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\left[-k_z A_6^{(+)} k_+ - k_+ A_6^{(-)} k_z\right] + \Delta\eta && (10)\\
\xi &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\left[-k_z A_6^{(-)} k_+ - k_+ A_6^{(+)} k_z\right] + \Delta\xi && (11)\\
\rho &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\left[i\,k_y\,(A_5^{(+)} - A_5^{(-)})k_x - i\,k_x\,(A_5^{(+)} - A_5^{(-)})k_y\right] && (12)\\
\Delta\xi &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\left[-(k_x - i\,k_y)A_z(k_x - i\,k_y)\right] && (13)\\
\Delta\eta &= \Delta\xi && (14)\\
\Delta\kappa &= -2\sqrt{2}\,\frac{\hbar^2}{2m_e}\,\left[(k_x + i\,k_y)\,A_z^{(+)}\,k_z + k_z\,A_z^{(-)}\,(k_x + i\,k_y)\right] && (15)
\end{aligned}
$$

on $A_5 = A_5^{(+)} + A_5^{(-)}$, $A_6 = A_6^{(+)} + A_6^{(-)}$ and $A_z = A_z^{(+)} + A_z^{(-)}$, $\Delta' = 0$ en WZ mentre que $\Delta' = \Delta_{SOC}$ en ZnBl.

Addicionalment cal incloure el potencial confinant $V_c(\mathbf{r})\,\mathbb{I}$, eventualment l'estrain H_{str}, el potencial piezoelectric $V_p(\mathbf{r})\,\mathbb{I}$ i la polarització espontània $V_{P_{sp}}(\mathbf{r})\,\mathbb{I}$.

Aquest Hamiltonià fa coincidir l'eix z amb l'eix c de l'estructura WZ i implica una rotació del de la ZnBl de manera que aquest eix z coincideix amb la direcció [111] de creixement cristal·lí de la ZnBl. Per tant, podem afegir el camp magnètic de la mateixa manera que ho fem amb la WZ, únicament cal tenir present que aquesta WZ té algun terme addicional k_z que cal incloure més un terme diagonal –en la zona ZnBl– com s'indica tot seguit: [1]

[1] Cal tenir també en compte la rotació del coeficients d'estrain i piezoelectricitar, ja rotats en la ZnBl, la polarització espontània de la zona ZW –que ha de rotar paral·lela a l'eix c, més el potencial confinant.

$$
\begin{aligned}
\mathbb{H}^{(polytype)}_{WZ/ZnBl} &= \Delta_1 \mathbb{L}_z^2 + \Delta_2 \mathbb{L}_z \sigma_z + \tfrac{1}{2}\,\Delta_3 (\mathbb{L}_+ \sigma_- + \mathbb{L}_- \sigma_+) \\
&- \tfrac{\Delta'}{3}\,\mathbb{I} \\
&+ \tfrac{\hbar^2}{2m_0} \Big\{ \mathbb{I}\, k_z A_1 k_z + \mathbb{L}_z^2\, k_z A_3 k_z + \mathbb{I}\,(k_x A_2 k_x + k_y A_2 k_y) + \mathbb{L}_z^2\,(k_x A_4 k_x + k_y A_4 k_y) \\
&- \mathbb{L}_z \left[i\, k_y (A_5^{(+)} - A_5^{(-)}) k_x - i\, k_x (A_5^{(+)} - A_5^{(-)}) k_y \right] \\
&- \tfrac{1}{2}\,\mathbb{L}_+^2\, k_-\, A_5\, k_- - \tfrac{1}{2}\,\mathbb{L}_-^2\, k_+\, A_5\, k_+ \\
&- \sqrt{2}\,\mathbb{L}_+^2 \left[(k_x + i\, k_y)\, A_z^{(+)}\, k_z + k_z\, A_z^{(-)}\, (k_x + i\, k_y) \right] \\
&- \sqrt{2}\,\mathbb{L}_-^2 \left[(k_x - i\, k_y)\, A_z^{(+)}\, k_z + k_z\, A_z^{(-)}\, (k_x - i\, k_y) \right] \\
&+ \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\,\mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_+ (k_z\, A_6^{(-)}\, k_+ + k_+\, A_6^{(+)}\, k_z\, + k_-\, A_z\, k_-) \\
&- \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\,\mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_- (k_z\, A_6^{(-)}\, k_- + k_-\, A_6^{(+)}\, k_z\, + k_+\, A_z\, k_+) \\
&- \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\,\mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_- (k_+\, A_6^{(-)}\, k_z + k_z\, A_6^{(+)}\, k_+\, + k_-\, A_z\, k_-) \\
&+ \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\,\mathbb{L}_- \cdot \mathbb{L}_+ \cdot \mathbb{L}_+ (k_-\, A_6^{(-)}\, k_z + k_z\, A_6^{(+)}\, k_-\, + k_+\, A_z\, k_+) \Big\}
\end{aligned}
\tag{16}
$$

Recordem que $\Delta' = 0$ en WZ i $\Delta' = \Delta_{SOC}$ en ZnBl (recordem també que en ZnBl $\Delta_2 = \Delta_3 = \Delta_{SOC}/3$). Finalment fem èmfasi en que com hem introduït el factor Δ' en el terme d'energia cinètica no l'introduirem en el de potencial corregint el band offset entre el materials adjacents de WZ i ZnBl.

References

[1] S. L. Chuang and C. S. Chang, Phys. Rev. B 54 (1996) 2491.