Simetria de l'Hamiltonià WZ sota C_{3h} i C_{6h}

Josep Planelles

May 8, 2015

La Taula de caràcters del C_{3h} és:

$\bar{C}_{3h}$	E	C_3^+	C_3^-	σ_h	S_3^+	S_3^-	$\bar{E}$	$\bar{C}_3^+$	$\bar{C}_3^-$	$\bar{\sigma}_h$	$\bar{S}_3^+$	$\bar{S}_3^-$	basis
A'	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	J_z
E'_+	1	ω	ω^*	1	ω	ω^*	1	ω	ω^*	1	ω	ω^*	$x+iy$
E'_-	1	ω^*	ω	1	ω^*	ω	1	ω^*	ω	1	ω^*	ω	$x-iy$
A''	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	z
E''_+	1	ω	ω^*	-1	$-\omega$	$-\omega^*$	1	ω	ω^*	-1	$-\omega$	$-\omega^*$	J_x+iJ_y
E''_-	1	ω^*	ω	-1	$-\omega^*$	$-\omega$	1	ω^*	ω	-1	$-\omega^*$	$-\omega$	J_x-iJ_y
$E_{-1/2}$	1	$-\omega$	ω^*	i	$-i\omega$	$i\omega^*$	-1	ω	$-\omega^*$	$-i$	$i\omega$	$-i\omega^*$	$J_{-1/2}$
$E_{1/2}$	1	$-\omega^*$	ω	$-i$	$i\omega^*$	$-i\omega$	-1	ω^*	$-\omega$	i	$-i\omega^*$	$i\omega$	$J_{1/2}$
$E_{5/2}$	1	$-\omega$	ω^*	$-i$	$i\omega$	$-i\omega^*$	-1	ω	$-\omega^*$	i	$-i\omega$	$i\omega^*$	
$E_{-5/2}$	1	$-\omega^*$	ω	i	$-i\omega^*$	$i\omega$	-1	ω^*	$-\omega$	$-i$	$i\omega^*$	$-i\omega$	
$E_{-3/2}$	1	-1	1	i	$-i$	i	-1	1	-1	$-i$	i	$-i$	
$E_{3/2}$	1	-1	1	$-i$	i	$-i$	-1	1	-1	i	$-i$	i	

(1)

where $\omega = e^{i\,\frac{2\pi}{3}}$ and J_i is the i-th component of the angular momentum.

La Taula de productes d'irreps de $\bar{\mathbf{C}}_{3h}$ és:

	A'	E'_+	E'_-	A''	E''_+	E''_-	$E_{-1/2}$	$E_{1/2}$	$E_{5/2}$	$E_{-5/2}$	$E_{-3/2}$	$E_{3/2}$
A'	A'	E'_+	E'_-	A''	E''_+	E''_-	$E_{-1/2}$	$E_{1/2}$	$E_{5/2}$	$E_{-5/2}$	$E_{-3/2}$	$E_{3/2}$
E'_+		E'_-	A'	E''_+	E''_-	A''	$E_{-5/2}$	$E_{3/2}$	$E_{1/2}$	$E_{-3/2}$	$E_{-1/2}$	$E_{5/2}$
E'_-			E'_+	E''_-	A''	E''_+	$E_{-3/2}$	$E_{5/2}$	$E_{3/2}$	$E_{-1/2}$	$E_{-5/2}$	$E_{1/2}$
A''				A'	E'_+	E'_-	$E_{5/2}$	$E_{-5/2}$	$E_{-1/2}$	$E_{1/2}$	$E_{3/2}$	$E_{-3/2}$
E''_+					E'_-	A'	$E_{1/2}$	$E_{-3/2}$	$E_{-5/2}$	$E_{3/2}$	$E_{5/2}$	$E_{-1/2}$
E''_-						E'_+	$E_{3/2}$	$E_{-1/2}$	$E_{-3/2}$	$E_{5/2}$	$E_{1/2}$	$E_{-5/2}$
$E_{-1/2}$							E''_-	A'	E'_-	A''	E''_+	E'_+
$E_{1/2}$								E''_+	A''	E'_+	E'_-	E''_-
$E_{5/2}$									E''_-	A'	E'_+	E''_+
$E_{-5/2}$										E''_+	E''_-	E'_-
$E_{-3/2}$											A''	A'
$E_{3/2}$												A''

(2)

L'Hamiltonià WZ és:[1]

$$\begin{bmatrix} F & -K^* & -H^* & 0 & 0 & 0 \\ -K & G & H & 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 \\ -H & H^* & \lambda & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F & -K & H \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & -K^* & G & -H^* \\ 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & 0 & H^* & -H & \lambda \end{bmatrix} \tag{3}$$

on:[1]

$$
\begin{aligned}
F &= \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta \\
G &= \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta \\
\lambda &= A_1 k_z^2 + A_2 k_\perp^2 \\
\theta &= A_3 k_z^2 + A_4 k_\perp^2 \\
K &= A_5 k_+^2 + \Delta K \\
H &= A_6 k_+ k_z + \Delta H \\
\Delta K &= 2\sqrt{2} A_z k_- k_z \\
\Delta H &= A_z k_-^2
\end{aligned} \tag{4}
$$

amb $A_z = 0$ (i, per tant $\Delta K = \Delta H = 0$) en el cas de WZ.

Considerem primer simetria rotacional pura. Calculem la simetria del diferents factors: $(k_z^2,\, k_\perp^2)$ que entren en F, G i λ, k_+^2 que entre en K i $k_+ k_z$ que entra en H (més els corresponents complexos conjugats), a partir de les simetries de: k_z (0), $k_x \pm i k_y$ (± 1). Obtenim que:

$$F, G, \lambda \;\rightarrow\; 0 \tag{5}$$
$$K \;\rightarrow\; 2 \tag{6}$$
$$K^* \;\rightarrow\; -2 \tag{7}$$
$$H \;\rightarrow\; 1 \tag{8}$$
$$H^* \;\rightarrow\; -1 \tag{9}$$

La simetria de l'Hamiltonià i l'equació simbòlica d'autovalors de l'autovector fonamental amb moment angular total $F_z = 3/2$ resulta:[2]

$$
\begin{bmatrix}
0 & -2 & -1 & - & - & - \\
2 & 0 & 1 & - & - & 0 \\
1 & -1 & 0 & - & 0 & - \\
- & - & - & 0 & 2 & 1 \\
- & - & 0 & -2 & 0 & -1 \\
- & 0 & - & -1 & 1 & 0
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 3 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 3 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} \tag{10}
$$

Considerem ara un confinament triangular amb un plànol horitzontal de simetria (C_{3h}) i, com abans, calculem la simetria del diferents factors: $(k_z^2,\, k_\perp^2)$ que entren en F, G i λ, k_+^2 que entre en K i $k_+ k_z$ que entra en H (més els corresponents complexos conjugats). Ho calculem a partir de les simetries de k_z i $k_x \pm i\, k_y$ que d'acord amb la taula 1 són A'' i $E'_\pm$, respectivament.[3] Aleshores obtenim:

$$F, G, \lambda \;\rightarrow\; A' \tag{11}$$
$$K \;\rightarrow\; (E'_+)^2 = E'_- \tag{12}$$
$$K^* \;\rightarrow\; E'_+ \tag{13}$$
$$H \;\rightarrow\; E'_+ A'' = E''_+ \tag{14}$$
$$H^* \;\rightarrow\; E''_- \tag{15}$$
$$\tag{16}$$

La simetria de l'Hamiltonià resulta

[1] Ometem el factor $\frac{\hbar^2}{2m_e}$ pel que han d'anar multiplicats tots els paràmetres A_i.

[2] Recordem que la seqüència de valors de J_z de les funcions de Bloch associades amb l'Hamiltonià 3 és: $3/2, -1/2, 1/2, -3/2, 1/2, -1/2$.

[3] La reducció de simetria $C_\infty \rightarrow C_3$ únicament ens diu que les simetries són $A, E_\pm$, però nosaltres estarem interessats en el comportament enfront de σ_h, és a dir en el caràcter bonding/anti-bonding, per això acudim a C_{3h}.

$$
\begin{bmatrix}
A' & E'_+ & E''_- & - & - & - \\
E'_- & A' & E''_+ & - & - & A' \\
E''_+ & E''_- & A' & - & A' & - \\
- & - & - & A' & E'_- & E''_+ \\
- & - & A' & E'_+ & A' & E''_- \\
- & A' & - & E''_- & E''_+ & A'
\end{bmatrix}
\tag{17}
$$

i les funcions bonding i antibonding fonamentals seràn:

$$
\begin{bmatrix} A' \\ E'_- \\ E''_+ \\ A' \\ E'_+ \\ E''_- \end{bmatrix}
\quad
\begin{bmatrix} A'' \\ E''_- \\ E'_+ \\ A'' \\ E''_+ \\ E'_- \end{bmatrix}
\tag{18}
$$

Veiem doncs una situació similar al cas ZB: la primera i quarta component (espín $3/2$ i $-3/2$) tenen la mateixa simetria, tant en el cas enllaçant com en l'anti-enllaçant. Ara bé, si mirem l'eq. 3 veiem que l'element (1,1) no pot interaccionar amb el (4,4) via pertorbacions de segon ordre, sinó de tercer (e.g. $H_{12}H_{26}H_{64}$ o $H_{13}H_{35}H_{54}$).

Possiblement, la mescla en QDs-molecules de ZB no tinga paral·lel en QDs-molecules de WZ, però cal tenir en compte que si fem zero el camp cristal·li i triem els paràmetres A_i dintre de l'aproximació quasi-cúbica, obtenim l'Hamiltonià ZB en la direcció [111], el qual recupera exactament simetria rotacional si fem $\Delta K = \Delta H = 0$. Amb açò la pinta de la matriu no canvia, però el "tercer ordre" de pertorbació és efectiu. Perquè? Perquè es converteix en segon ordre si canviem les bases de Bloch adaptant-les de moment angular total, que suposa combinar columnes 2 i 6 per un costat i 3 i 5 per un altre, cosa que origina termes que permeten el link dels elements 1 i 4 a segon ordre i no tercer.

Considerem ara el grup de l'hexàgon.

C_{6h}	E	C₆(z)	C₃	C₂	(C₃)²	(C₆)⁵	i	(S₃)⁵	(S₆)⁵	σ_h	S₆	S₃	linear functions, rotations	quadratic functions	cubic functions
A_g	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	R_z	x^2+y^2, z^2	-
B_g	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-	-	-
E_{1g}	+1 +1	+ε +ε*	-ε* -ε	-1 -1	-ε -ε*	+ε* +ε	+1 +1	+ε +ε*	-ε* -ε	-1 -1	-ε -ε*	+ε* +ε	R_x+iR_y R_x-iR_y	(xz, yz)	-
E_{2g}	+1 +1	-ε* -ε	-ε -ε*	+1 +1	-ε* -ε	-ε -ε*	+1 +1	-ε* -ε	-ε -ε*	+1 +1	-ε* -ε	-ε -ε*	-	(x^2-y^2, xy)	-
A_u	+1	+1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	z	-	z^3, $z(x^2+y^2)$
B_u	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-	-	$y(3x^2-y^2)$, $x(x^2-3y^2)$
E_{1u}	+1 +1	+ε +ε*	-ε* -ε	-1 -1	-ε -ε*	+ε* +ε	-1 -1	-ε -ε*	+ε* +ε	+1 +1	+ε +ε*	-ε* -ε	x+iy x-iy	-	(xz^2, yz^2) $[x(x^2+y^2), y(x^2+y^2)]$
E_{2u}	+1 +1	-ε* -ε	-ε -ε*	+1 +1	-ε* -ε	-ε -ε*	-1 -1	+ε* +ε	+ε +ε*	-1 -1	+ε* +ε	+ε +ε*	-	-	$[xyz, z(x^2-y^2)]$

$\varepsilon = \exp(2\pi i/6)$

Figure 1: Taula de caràcters del grup C_{6h}

Procedint de manera anàloga, trobem en la taula de la Figura 1 que k_z i $k_x \pm i\, k_y$ són de simetria A_u i $E^{\pm}_{1u}$, respectivament. Per tant, k_+^2 és de simetria $(E^{(+)}_{1u})^2 = E^{(+)}_{2g}$ i $k_+ k_z$ de simetria $E_{1u} \times A_u = E^{(+)}_{1g}$. Les constants són de simetria A_g. Amb açò construïm l'Hamiltonià:

Direct product table (for binary products only)

C_{6h}	A_g	B_g	E_{1g}	E_{2g}	A_u	B_u	E_{1u}	E_{2u}	
A_g	A_g	B_g	E_{1g}	E_{2g}	A_u	B_u	E_{1u}	E_{2u}	A_g
B_g	B_g	A_g	E_{2g}	E_{1g}	B_u	A_u	E_{2u}	E_{1u}	B_g
E_{1g}	E_{1g}	E_{2g}	$A_g \oplus [A_g] \oplus E_{2g}$	$2\,B_g \oplus E_{1g}$	E_{1u}	E_{2u}	$2\,A_u \oplus E_{2u}$	$2\,B_u \oplus E_{1u}$	E_{1g}
E_{2g}	E_{2g}	E_{1g}	$2\,B_g \oplus E_{1g}$	$A_g \oplus [A_g] \oplus E_{2g}$	E_{2u}	E_{1u}	$2\,B_u \oplus E_{1u}$	$2\,A_u \oplus E_{2u}$	E_{2g}
A_u	A_u	B_u	E_{1u}	E_{2u}	A_g	B_g	E_{1g}	E_{2g}	A_u
B_u	B_u	A_u	E_{2u}	E_{1u}	B_g	A_g	E_{2g}	E_{1g}	B_u
E_{1u}	E_{1u}	E_{2u}	$2\,A_u \oplus E_{2u}$	$2\,B_u \oplus E_{1u}$	E_{1g}	E_{2g}	$A_g \oplus [A_g] \oplus E_{2g}$	$2\,B_g \oplus E_{1g}$	E_{1u}
E_{2u}	E_{2u}	E_{1u}	$2\,B_u \oplus E_{1u}$	$2\,A_u \oplus E_{2u}$	E_{2g}	E_{1g}	$2\,B_g \oplus E_{1g}$	$A_g \oplus [A_g] \oplus E_{2g}$	E_{2u}
	A_g	B_g	E_{1g}	E_{2g}	A_u	B_u	E_{1u}	E_{2u}	

Figure 2: Taula productes de simetries del grup C_{6h}

$$\begin{bmatrix} A_g & E_{2g}^{(-)} & E_{1g}^{(-)} & - & - & - \\ E_{2g}^{(+)} & A_g & E_{1g}^{(+)} & - & - & A_g \\ E_{1g}^{(+)} & E_{1g}^{(-)} & A_g & - & A_g & - \\ - & - & - & A_g & E_{2g}^{(+)} & E_{1g}^{(+)} \\ - & - & A_g & E_{2g}^{(-)} & A_g & E_{1g}^{(-)} \\ - & A_g & - & E_{1g}^{(-)} & E_{1g}^{(+)} & A_g \end{bmatrix} \tag{19}$$

La funció bonding fonamental ($F_z = 3/2$) la podem deduir de l'Hamiltonià anterior, excepte la quarta component que en el grup de la línia tenia un moment angular $L_z = 3$ $[f(\theta) = e^{i\,3\theta}]$ i que per reducció de simetria fins a C_{6h} (calculant els caràcters de $f(\theta)$ en C_{6h}) concloem que pot ser B_u o B_g. L'equació d'autovalors ens fa descartar B_u. El corresponent antibonding el determinaríem de manera semblant. Quedant així els autovectors:

$$\begin{bmatrix} A_g \\ E_{2g}^{(+)} \\ E_{1g}^{(+)} \\ B_g \\ E_{1g}^{(+)} \\ E_{2g}^{(+)} \end{bmatrix} ; \begin{bmatrix} A_u \\ E_{2u}^{(+)} \\ E_{1u}^{(+)} \\ B_u \\ E_{1u}^{(+)} \\ E_{2u}^{(+)} \end{bmatrix}$$

Allò important a remarcar és que primera i quarta component tenen simetries diferents i per tant no es poden mesclar.

References

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