

Simetria esfèrica i degeneració a camp magnetic nul per a potencials confinants esfèrics en Hamiltonians ZB

Josep Planelles

March 23, 2016

1 Introducció

L'Hamiltonià de LK pot ser escrit en la forma,

$$H = \frac{1}{m} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \frac{p^2}{2} - \gamma_2 \sum_i^{x,y,z} p_i^2 \mathbb{I}_i^2 - 3\gamma_3 \sum_i^{x,y,z} \{p_i, p_{i+1}\} \{\mathbb{I}_i, \mathbb{I}_{i+1}\} \right] \quad (1)$$

Si definim[1] els tensors cartesianes simètrics de traça nula $P_{ik} = 3p_i p_k - \delta_{ik} p^2$ i $\mathbb{J}_{ik} = \frac{3}{2}(\mathbb{I}_i \mathbb{I}_k + \mathbb{I}_k \mathbb{I}_i) - \delta_{ik} \mathbb{I}^2$ el transformem en:

$$H = \frac{\gamma_1}{2m} p^2 - \frac{1}{9m} \sum_{ij}^{x,y,z} [\gamma_3 - (\gamma_3 - \gamma_2) \delta_{ij}] P_{ij} \mathbb{J}_{ij} \quad (2)$$

La simetria i traça zero dels tensors cartesianes fa que sols tinguin components D_{2g} en escriure'ls en termes de tensors esfèrics (D_{0g} és la traça i D_{1g} és antisimètric), cosa que permet escriure:

$$H = \frac{\gamma_1}{2m} p^2 - \frac{3\gamma_3 + 2\gamma_2}{45m} P^{(2)} \cdot \mathbb{J}^{(2)} + \frac{\gamma_3 - \gamma_2}{18m} [\text{termes cúbics}] \quad (3)$$

L'aproximació esfèrica, $\gamma_2 = \gamma_3$, permet escriure H en termes de tensors esfèrics únicament. A més p^2 , així com el producte escalar $P^{(2)} \cdot \mathbb{J}^{(2)}$, són invariants sota $SO(3)$. Aquest darrer terme $P^{(2)} \cdot \mathbb{J}^{(2)}$ s'anomena d'espín-òrbita (malgrat que no ho és) perquè, igual que $L \cdot S$, és un producte escalar de dos tensors esfèrics.

Si rebutgem el terme espín-òrbita, aleshores $H = \frac{\gamma_1}{2m} p^2$ és diagonal i per tant les funcions d'ona són $\Psi_{ij} = \phi_{ij} u_i$, on u_i és la funció de Bloch i ϕ_{ij} la j -èssima envelopant associada a u_i . Per tant, L (envelopant) i J (Bloch) són bons nombres quàntics separadament.

Si incloem el terme d'espín-òrbita, aleshores hi ha acoblament de bandes i resulta que $\Psi_k = \sum_i \phi_{ik} u_i$. És a dir, passa com en física atòmica en que el terme d'espín-òrbita fa que L i S ja no siguin bons nombres quàntics. Però el sistema té simetria esfèrica i permet definir el moment angular total $J = L + S$ que és un invariant i etiqueta les irreps de $SO(3)$ perquè J^2 i J_z commuten amb l'Hamiltonià atòmic inclòs el terme d'espín-òrbita.

De forma semblant a la física atòmica, se pot definir, per al cas que ara ens ocupa, el moment angular total $F = L + J$, de manera que com resulta que F^2 i F_z commuten amb la versió esfèrica de l'Hamiltonià eq. (3) –i.e. H sense el terme cúbic– tenim que F justificarà les degeneracions i, per tant, etiquetarà les irreps de $SO(3)$.

Per exemple, a partir de $L = 0$ i $J = 3/2$ trobem $F = 0 \times 3/2 = 3/2$ i, d'acord amb la nomenclatura standard¹ (nL_J), trobem un terme $S_{3/2}$. Anàlogament, $1 \times 3/2 = 5/2 + 3/2$, trobem doncs els termes $P_{3/2}$ i $P_{5/2}$, etc.

En resum, les simetries esfèriques són aproximades (fruit de rebutjar els termes cúbics). Si tenim simetria axial (causada pel potencial confinant, el camp magnètic o en l'Hamiltonià de WZ, etc.) trobarem la degeneració de F_z .

References

- [1] Baldereschi A. and Lippari N.O., Phys. Rev. B 8 (1973) 2697.

¹En aquesta notació $n = 1, 2, 3 \dots$ distingeix estats amb idèntica simetria però diferent energia.