Tarea 9

1.
Considerar el hamiltoniano de tight binding, incluyendo la interacción espín-órbita, en la base de estados $\left|S\uparrow\right\rangle, \left|S\downarrow\right\rangle$, $\left|J, J_z\right\rangle$ que diagonaliza esta última. (Omitimos aquí el índice L (dado que siempre tenemos L =1) y S (dado que siempre tenemos S = ½) para enumerar los estados. Mostrar que en esta base, para $\boldsymbol{k}$ =0,

$$\left\langle J_A, J_{zA}\right|H\left|J_B, J_{zB}\right\rangle = V_{xx}\delta_{J_A J_B}\delta_{J_{zA}, J_{zB}}$$

de modo que el bloque no-diagonal del hamiltoniano es

$$H_{AB} =$$

$$\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{cccccccc} \left(S\uparrow\right)_B & \left(S\downarrow\right)_B & \left(\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right)_B & \left(\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right)_B & \left(\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right)_B & \left(\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right)_B & \left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)_B & \left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)_B \end{array} \\
\begin{array}{c} \left(S\uparrow\right)_A \\ \left(S\downarrow\right)_A \\ \left(\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right)_A \\ \left(\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right)_A \\ \left(\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right)_A \\ \left(\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right)_B \\ \left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)_B \\ \left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)_B \end{array} &
\begin{pmatrix}
V_{ss} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & V_{ss} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & V_{xx} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & V_{xx} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & V_{xx} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_{xx} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_{xx} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_{xx}
\end{pmatrix}
\end{array}$$

2.
Ir a una base de datos de semiconductores (por ejemplo http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/index.html) y buscar las masas efectivas m_e de los electrones (banda de conducción) para $\boldsymbol{k}$ =0 (punto Γ de la zona de Brilloin), del band gap E_0 en el punto Γ, y de la separación espín-órbita Δ_0 en el mismo punto para varios semiconductores. Graficar de alguna manera esos resultados para resaltar la validez (o no) de la expresión derivada en clase,

$$\frac{m}{m_e} = 1 + \frac{2P^2}{3m}\left(\frac{2}{E_0} + \frac{1}{E_0 + \Delta_0}\right)$$

Challenge problem
Considerar, dentro del formalismo de tight-binding, los elementos de matriz del operador momentum entre los estados que representan la combinación s-antibonding (banda de conducción), p-bonding (banda de valencia) y p-antibonding (banda de conducción). Mostrar que los únicos elementos distintos de cero son

$$\left\langle S_a\right|p_x\left|X_b\right\rangle = \left\langle S_a\right|p_y\left|Y_b\right\rangle = \left\langle S_a\right|p_z\left|Z_b\right\rangle = iP$$
$$\left\langle X_b\right|p_y\left|Z_a\right\rangle = \left\langle Y_b\right|p_z\left|X_a\right\rangle = \left\langle Z_b\right|p_x\left|Y_a\right\rangle = \left\langle X_b\right|p_y\left|Z_a\right\rangle = \left\langle Y_b\right|p_x\left|Z_a\right\rangle = \left\langle Z_b\right|p_y\left|X_a\right\rangle = iQ$$

Hint: Notar que las funciones S, X,Y,Z son combinaciones de Bloch de funciones atómicas, de modo que los elementos de matriz que aparecen arriba son sumas (con coeficientes apropiados) de elementos de matriz de p entre estados atómicos de un átomo y sus vecinos. Estos elementos aparecen, por ejemplo, en el apéndice del artículo "Theory of dielectric-function anisotropies of (001) GaAs (2×1) surfaces," Y.-C. Chang and D. E. Aspnes, Phys. Rev. B **41** (17), 12002 (1990), aunque la notación es un poco distinta a la que hemos usado en clase.

donde V es el volumen que contiene a las ondas planas. Interpretar esta expresión en términos de conservación de la cantidad de movimiento.