Temas $\langle$avanzados$\rangle$ de Mecánica Cuántica

DF-FCEN-UBA, Segundo Cuatrimestre 2018

Guía 2: Operadores de campo, polarización interbanda y ecuaciones de Bloch ópticas y de semiconductores

1 Modelo de Bose-Hubbard

El Hamiltoniano de Bose-Hubbard es un buen modelo para describir el régimen altamente correlacionado de átomo bosónicos en redes ópticas.

La interacción entre átomos la describimos como colisiones elásticas a energías bajas entre átomos neutros y despreciamos las interacciones de largo alcance. En estas condiciones podemos reemplazar el potencial de interacción por un pseudopotencial:

$$V(r-r') = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}\delta(r-r') = g\delta(r-r'). \tag{1}$$

El Hamiltoniano en función de los operadores de campo $\hat{\Psi}^\dagger$ y $\hat{\Psi}$ se escribe,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int dr\, \hat{\Psi}^\dagger(r,t)\left(-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2 + V^{ext}\right)\hat{\Psi}(r,t) \\ &+\frac{1}{2}\int dr \int dr' \hat{\Psi}^\dagger(r,t)\hat{\Psi}^\dagger(r',t)V(r-r')\hat{\Psi}(r,t)\hat{\Psi}(r',t) \end{aligned} \tag{2}$$

Los operadores de campo $\hat{\Psi}$ siempre los podemos expandir en términos de los operadores de destrucción asociados a la base de funciones de Bloch,

$$\hat{\Psi}(r) = \sum_{n,k}\phi_{n,k}(r)\hat{b}_{n,k} \tag{3}$$

con $[T + V^{ext}]\phi_{nk}(r) = E_{n,k}\phi_{nk}(r)$, donde n es el índice de banda y k el cuasi-momento. Suponemos una forma separable para el potencial de red tridimensional de la red óptica, $V^{ext} = \sum_{l=x,y,z} V_{0l}\sin^2\left(\frac{\pi l}{a}\right)$, donde a juega el rol de constante de la red. Lo siguiente es hacer la aproximación *tight-binding*: expandimos el operador de campo en términos de los operadores de destrucción asociados a la base de funciones de Wannier, que son funciones localizadas en los sitios de la red, $w_{ni} = w_n(r-R_i)$ donde R_i corresponde al mínimo del potencial de la red,

$$\hat{\Psi}(r) = \sum_{n,i} w_{ni}(r)\hat{b}_{ni} \tag{4}$$

donde $[\hat{b}_{ni}, \hat{b}^{\dagger}_{mj}] = \delta_{ni,mj}$. Esta aproximación es válida a bajas temperaturas cuando las energías de interacción no alcanzan para excitar estados vibracionales altos. En lo que sigue suponemos que hay una sola banda y omitimos el índice n.

Obtenga el Hamiltoniano de Bose-Hubbard,

$$\begin{aligned} \hat{H} &:= \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} && (5)\\ \hat{T} &:= -\sum_{<i,j>} t_{ij}(b_i^{\dagger} b_j) && (6)\\ \hat{U} &:= \frac{U}{2}\sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) && (7)\\ \hat{V} &:= \sum_i v_i^{\text{ext}} \hat{n}_i \qquad , && (8) \end{aligned}$$

donde ${}_{<i,j>}$ indica que solo se tiene en cuenta tunneling entre primeros vecinos (notar que como el par i, j aparece 2 veces en la suma la hermiticidad está asegurada). Suponemos el caso que todos los sitios están nivelados, $v_i = 0$ y hacemos las siguientes identificaciones:

- el elemento de matriz para tunneling $t_{ij} = -\int dr w_i^*(r)(-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2 + V^{ext})w_j(r)$
- interacción solo entre partículas que estén en el mismo sitio: $U = g\int dr|w_i(r)|^4$

2 Polarización interbanda

El operador de polarización, escrito en segunda cuantización, está dado por:

$$\hat{\mathbf{P}}(t) = \sum_s \int d^3r\, \hat{\Psi}_s^{\dagger}(\mathbf{r}, t)\, e\mathbf{r}\, \hat{\Psi}_s(\mathbf{r}, t), \tag{9}$$

donde $-e$ es la carga del electrón y $\hat{\Psi}_s^{\dagger}(\mathbf{r}, t)$ $(\hat{\Psi}_s(\mathbf{r}, t))$ es el operador de campo de creación (destrucción). (Ver capítulo 10 de Haug y Koch.) Tomando el valor de expectación de este operador sobre el estado inicial del sistema de muchas partículas, se obtiene el vector de polarización (valor medio del dipolo eléctrico $e\mathbf{r}$):

$$\mathbf{P}(t) = \sum_s \int d^3r\, \langle\hat{\Psi}_s^{\dagger}(\mathbf{r}, t)\, e\mathbf{r}\, \hat{\Psi}_s(\mathbf{r}, t)\rangle \tag{10}$$

Demostrar que el vector de polarización se puede escribir en términos de la polarización interbanda de la siguiente forma:

$$\mathbf{P}(t) = \sum_{\mathbf{k}} P_{cv,\mathbf{k}}(t) d_{vc} + \text{c.c.} \tag{11}$$

3 Ecuaciones de Bloch ópticas

Ejercicio 5.1 del libro de Haug y Koch.

4 Ecuaciones de Bloch de Semiconductores

El Hamiltoniano electrónico de un semiconductor en el modelo de dos bandas está dado por:

$$\begin{aligned} H_{el} &= \sum_{\mathbf{k}} (E_{c,k} a^\dagger_{c,\mathbf{k}} a_{c,\mathbf{k}} + E_{v,k} a^\dagger_{v,\mathbf{k}} a_{v,\mathbf{k}}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}\neq 0} V_q \Big(a^\dagger_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}} a^\dagger_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{c,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} \\ &+ a^\dagger_{v,\mathbf{k}+\mathbf{q}} a^\dagger_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}'} a_{v,\mathbf{k}} + 2\, a^\dagger_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}} a^\dagger_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} \Big) \end{aligned} \tag{12}$$

La interacción con luz en la aproximación dipolar introduce el Hamiltoniano:

$$H_d \simeq - \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(t) (a^\dagger_{c,\mathbf{k}} a_{v,\mathbf{k}} d_{cv} + h.c.) \tag{13}$$

El objetivo de este ejercicio es deducir la ecuación de movimiento de la ocupación de la banda de conducción en la aproximación de campo medio Random-phase approximation (RPA), también llamada Time-Dependent Hartree-Fock approximation (TDHF). Fuente: Secciones 10.1 y 12.1 del libro de Haug y Koch

(1) Obtener la ecuación de movimiento de Heisenberg para el operador de ocupación $\hat{n}_{c,\mathbf{k}} = \hat{a}^\dagger_{c,\mathbf{k}} \hat{a}_{c,\mathbf{k}}$. Tomando el valor medio de esta ecuación sobre el estado inicial se obtiene para la ocupación $n_{c,\mathbf{k}} = \langle \hat{n}_{c,\mathbf{k}} \rangle$ una ecuación similar a la (10.18) para la polarización interbanda.

(2) Realizar la aproximación RPA y obtener la ecuación de evolución que forma parte de las *semiconductor Bloch equations*:

$$\frac{\partial n_{c,\mathbf{k}}}{\partial t} = -2 \mathrm{Im} \left(\Omega_{R,\mathbf{k}} P^*_{\mathbf{k}} \right), \tag{14}$$

donde utilizamos la frecuencia de Rabi generalizada

$$\Omega_{R,\mathbf{k}} \equiv \frac{1}{\hbar} \left(d_{cv} \mathcal{E} + \sum_{\mathbf{q}\neq\mathbf{k}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} P_{\mathbf{q}} \right) \tag{15}$$