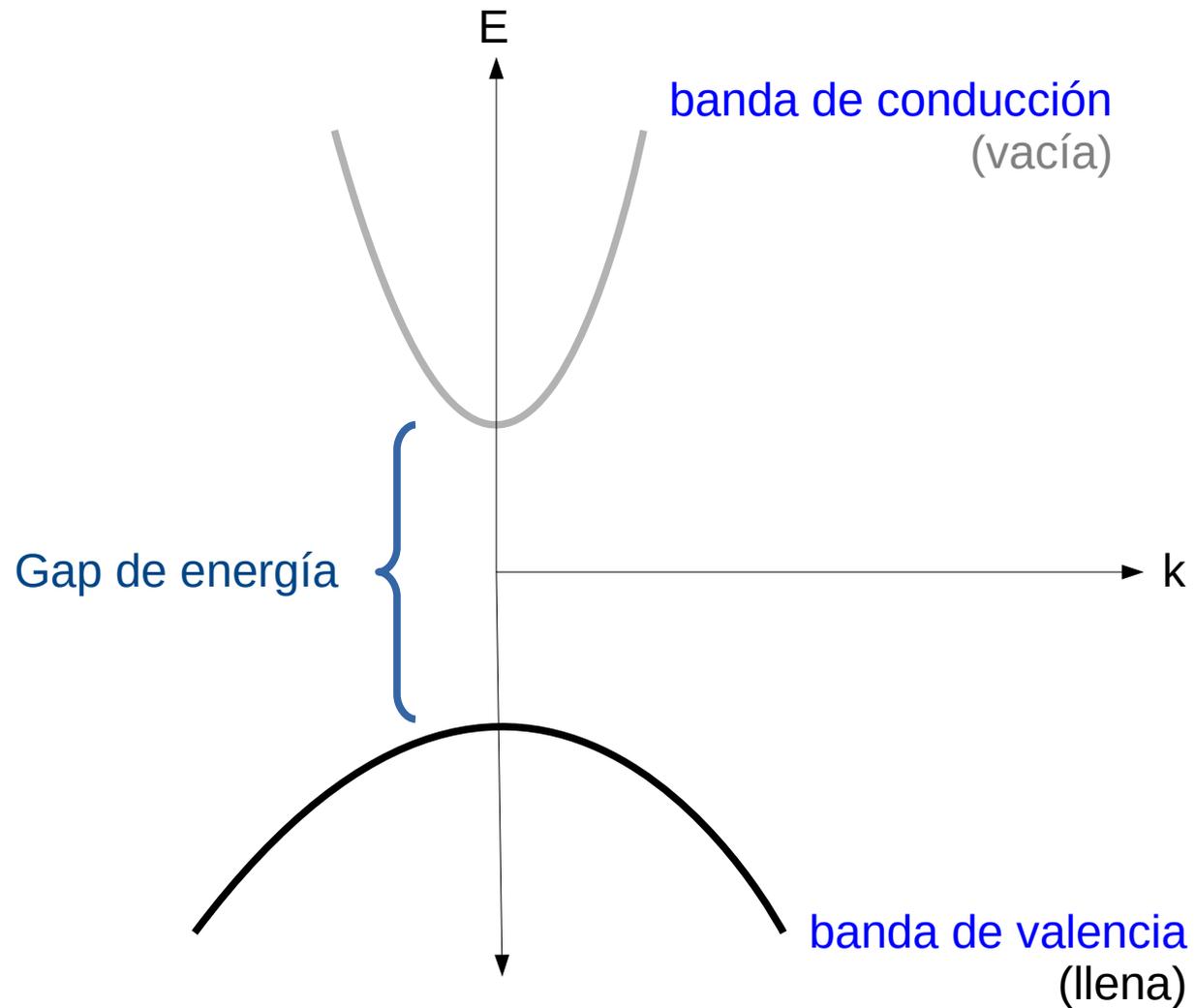


Transiciones ópticas en sólidos: Ecuaciones de Bloch de Semiconductores

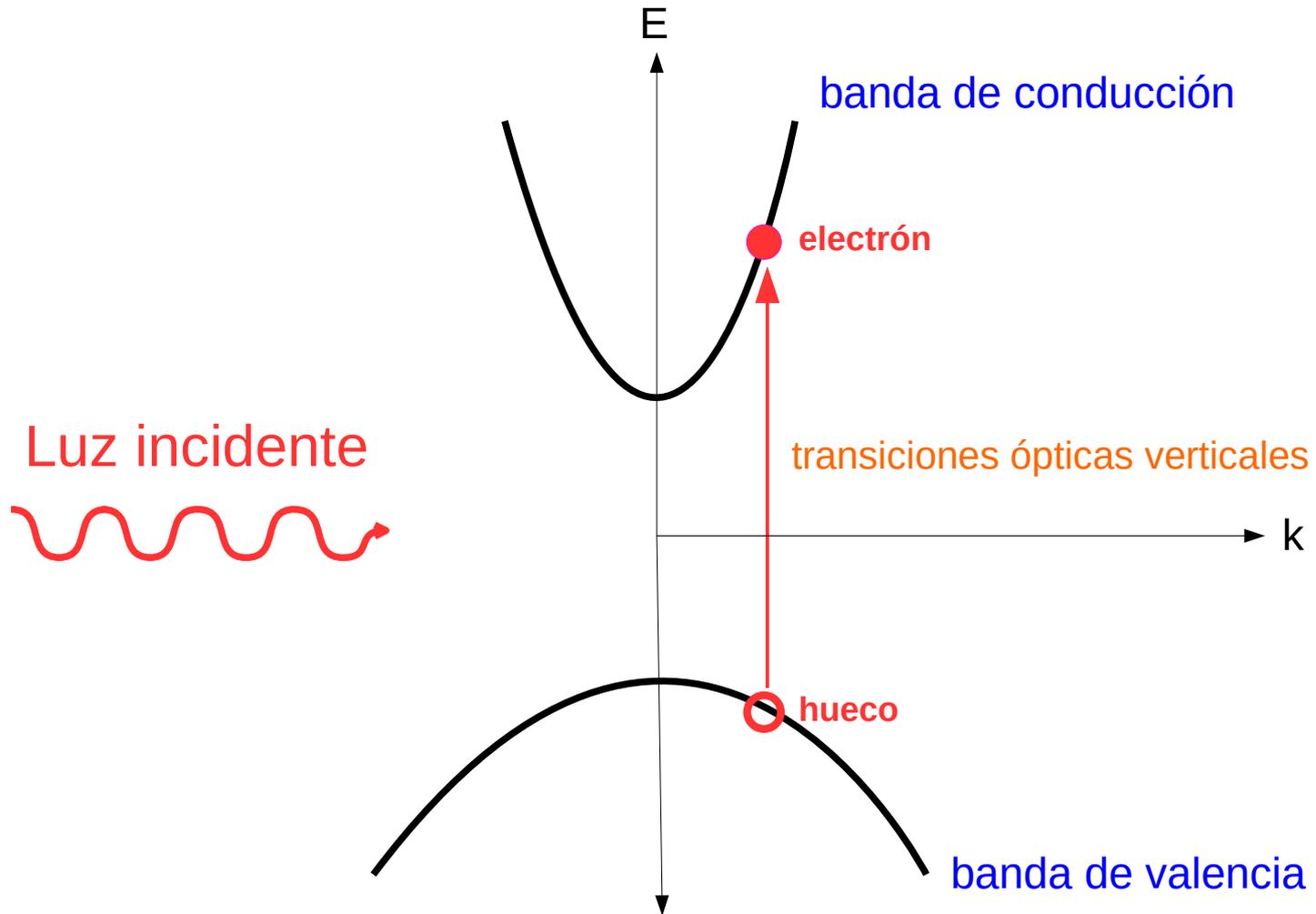
- Transiciones ópticas interbanda
- Ecuaciones de Bloch ópticas
- Inclusión de interacción e-e, aproximación de campo medio:
ecuaciones de Bloch de semiconductores

- **Transiciones ópticas interbanda**
- Ecuaciones de Bloch ópticas
- Inclusión de interacción e-e, aproximación de campo medio:
ecuaciones de Bloch de semiconductores

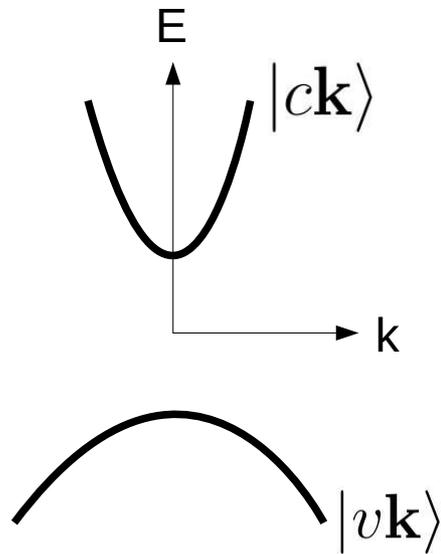
Bandas de energía de un semiconductor



Transiciones ópticas interbanda



Estados de Bloch y Hamiltoniano



Estados de Bloch del cristal:

$$|\lambda\mathbf{k}\rangle \rightarrow \psi_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Dos bandas: $\lambda = v, c$

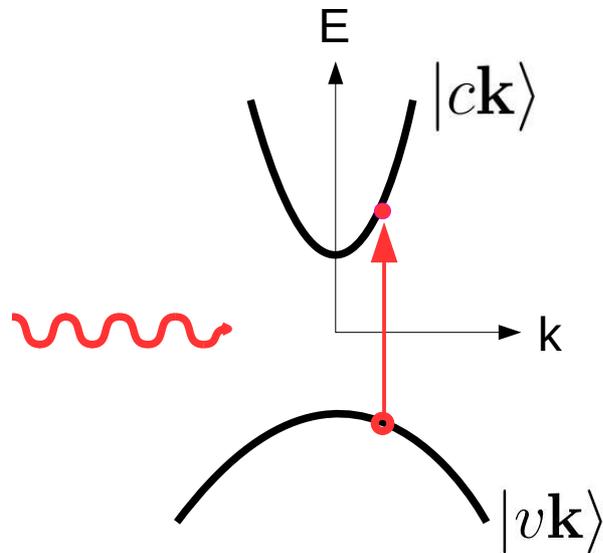
Ortonormalidad: $\langle \lambda'\mathbf{k}' | \lambda\mathbf{k} \rangle = \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$

Hamiltoniano de los electrones en el cristal:

$$H_0 = \sum_{\lambda\mathbf{k}} E_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda,\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda,\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} (E_{c,\mathbf{k}} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} + E_{v,\mathbf{k}} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}})$$

$$E_{c,\mathbf{k}} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c^*} \quad E_{v,\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v^*}$$

Interacción dipolar luz-electrón



Campo eléctrico de la luz:

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}(t)\hat{\mathbf{x}}$$

Hamiltoniano de interacción dipolar:

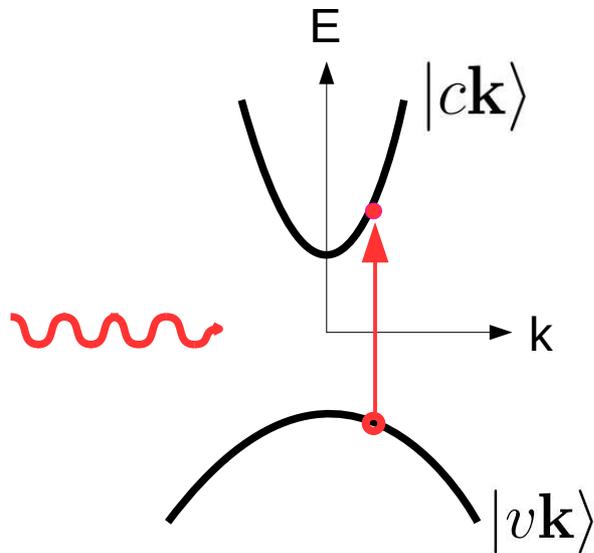
$$\hat{h}_{\text{int}} = -\mathbf{d} \cdot \mathcal{E}(t) = -e\mathbf{r} \cdot \mathcal{E}(t)$$

↙ momento dipolar eléctrico

En segunda cuantización:

$$H_{\text{int}} = - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \lambda, \lambda'} \mathcal{E}(t) \cdot \langle \lambda' \mathbf{k}' | e\mathbf{r} | \lambda \mathbf{k} \rangle a_{\lambda', \mathbf{k}'}^\dagger a_{\lambda, \mathbf{k}}$$

Interacción dipolar luz-electrón



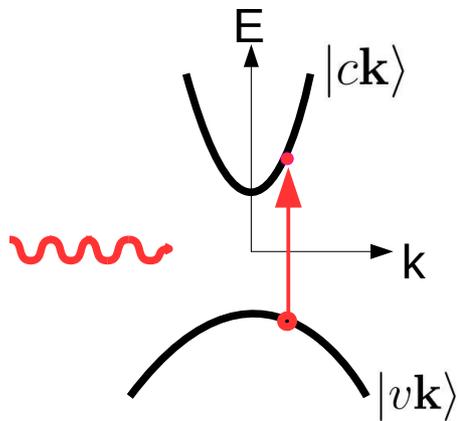
Elemento de matriz del momento dipolar eléctrico:

$$\langle \lambda' \mathbf{k}' | e \mathbf{r} | \lambda \mathbf{k} \rangle \simeq \mathbf{d}_{\lambda' \lambda}(0) \delta_{\mathbf{k}' \mathbf{k}}$$

Hamiltoniano de interacción dipolar en el modelo de dos bandas (en segunda cuantización):

$$H_{\text{int}} = - \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(t) \left(d_{cv} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} + d_{vc} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} \right)$$

Dinámica cuántica de la excitación óptica



Hamiltoniano completo: $H = H_0 + H_{\text{int}}$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} (E_{c,\mathbf{k}} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} + E_{v,\mathbf{k}} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}})$$

$$H_{\text{int}} = - \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(t) \left(d_{cv} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} + d_{vc} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} \right)$$

Introducimos el operador: $P_{\mu\nu,\mathbf{q}}(t) \equiv a_{\mu,\mathbf{q}}^\dagger(t) a_{\nu,\mathbf{q}}(t)$

Que incluye la polarización interbanda y las ocupaciones:

$$P_{vc,\mathbf{q}} \quad n_{c,\mathbf{q}} = P_{cc,\mathbf{q}} \quad n_{v,\mathbf{q}} = P_{vv,\mathbf{q}}$$

Dinámica cuántica de la excitación óptica

Ecuación de movimiento en el picture de Heisenberg:

$$i\hbar \frac{d}{dt} P_{\mu\nu, \mathbf{q}}(t) = [P_{\mu\nu, \mathbf{q}}(t), H] = [P_{\mu\nu, \mathbf{q}}(t), H_0 + H_{\text{int}}]$$

$$P_{\mu\nu, \mathbf{q}}(t) \equiv a_{\mu, \mathbf{q}}^\dagger(t) a_{\nu, \mathbf{q}}(t)$$
$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} (E_{c, \mathbf{k}} a_{c, \mathbf{k}}^\dagger a_{c, \mathbf{k}} + E_{v, \mathbf{k}} a_{v, \mathbf{k}}^\dagger a_{v, \mathbf{k}})$$
$$H_{\text{int}} = - \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(t) (d_{cv} a_{c, \mathbf{k}}^\dagger a_{v, \mathbf{k}} + d_{vc} a_{v, \mathbf{k}}^\dagger a_{c, \mathbf{k}})$$

Reemplazando:

$$i\hbar \frac{d}{dt} P_{\mu\nu, \mathbf{q}}(t) = \sum_{\lambda \mathbf{k}} E_{\lambda \mathbf{k}} [a_{\mu, \mathbf{k}}^\dagger a_{\nu, \mathbf{k}}, a_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda, \mathbf{k}}] - \sum_{\mathbf{k}} d_{cv} \mathcal{E}(t) [a_{\mu, \mathbf{k}}^\dagger a_{\nu, \mathbf{k}}, a_{c, \mathbf{k}}^\dagger a_{v, \mathbf{k}}] - \sum_{\mathbf{k}} d_{vc} \mathcal{E}(t) [a_{\mu, \mathbf{k}}^\dagger a_{\nu, \mathbf{k}}, a_{v, \mathbf{k}}^\dagger a_{c, \mathbf{k}}]$$

Dinámica cuántica de la excitación óptica

$$i\hbar \frac{d}{dt} P_{\mu\nu, \mathbf{q}}(t) = \sum_{\lambda \mathbf{k}} E_{\lambda \mathbf{k}} \left[a_{\mu, \mathbf{q}}^\dagger a_{\nu, \mathbf{q}}, a_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda, \mathbf{k}} \right] - \sum_{\mathbf{k}} d_{c\nu} \mathcal{E}(t) \left[a_{\mu, \mathbf{q}}^\dagger a_{\nu, \mathbf{q}}, a_{c, \mathbf{k}}^\dagger a_{\nu, \mathbf{k}} \right] \\ - \sum_{\mathbf{k}} d_{\nu c} \mathcal{E}(t) \left[a_{\mu, \mathbf{q}}^\dagger a_{\nu, \mathbf{q}}, a_{\nu, \mathbf{k}}^\dagger a_{c, \mathbf{k}} \right]$$

Conmutador necesario!

$$[a_i^\dagger a_j, a_k^\dagger a_l] = \delta_{jk} a_i^\dagger a_l - \delta_{il} a_k^\dagger a_j$$

Ecuaciones de Bloch ópticas (para los operadores)

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[i\hbar \frac{d}{dt} - (E_{c,\mathbf{q}} - E_{v,\mathbf{q}}) \right] \hat{P}_{vc,\mathbf{q}} = (\hat{n}_{c,\mathbf{q}} - \hat{n}_{v,\mathbf{q}}) d_{cv} \mathcal{E}(t) \\ \hbar \frac{d}{dt} \hat{n}_{c,\mathbf{q}} = 2 \mathcal{E}(t) \operatorname{Im} \left(d_{cv}^* \hat{P}_{vc,\mathbf{q}} \right) \\ \frac{d}{dt} \hat{n}_{v,\mathbf{q}} = - \frac{d}{dt} \hat{n}_{c,\mathbf{q}} \end{array} \right.$$

Ocupaciones y polarización

Tomamos el valor de expectación sobre el estado inicial $|\Psi_0\rangle$:

$$P(t) \equiv \langle \Psi_0 | \hat{P}_{vc,\mathbf{q}}(t) | \Psi_0 \rangle$$

$$n_c(t) \equiv \langle \Psi_0 | \hat{n}_{c,\mathbf{q}}(t) | \Psi_0 \rangle$$

$$n_v(t) \equiv \langle \Psi_0 | \hat{n}_{v,\mathbf{q}}(t) | \Psi_0 \rangle$$

- Transiciones ópticas interbanda
- **Ecuaciones de Bloch ópticas**
- Inclusión de interacción e-e, aproximación de campo medio:
ecuaciones de Bloch de semiconductores

Ecuaciones de Bloch ópticas (para ocupaciones y polarización)

$$\left[i\hbar \frac{d}{dt} - (E_{c,\mathbf{q}} - E_{v,\mathbf{q}}) \right] P(t) = [n_c(t) - n_v(t)] d_{cv} \mathcal{E}(t)$$

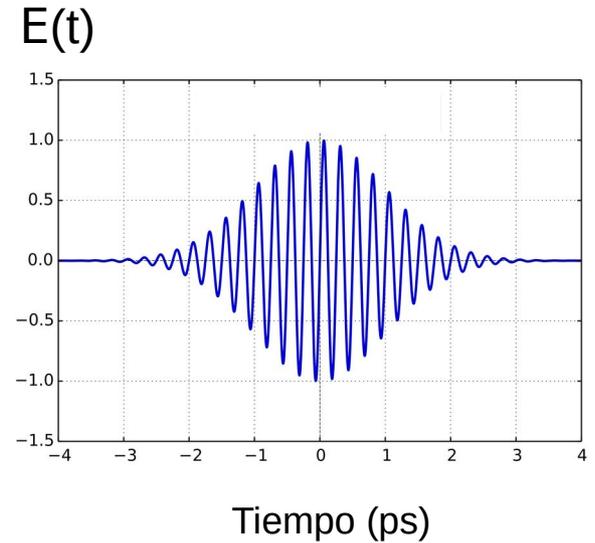
$$\hbar \frac{d}{dt} n_c(t) = 2 \mathcal{E}(t) \text{Im} [d_{cv}^* P(t)]$$

$$\frac{d}{dt} n_v(t) = -\frac{d}{dt} n_c(t)$$

$$n_c(t) + n_v(t) = 1$$

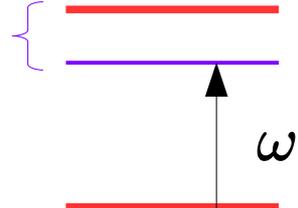
Dependencia temporal del campo eléctrico de la luz:

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0(t) \cos \omega t = \frac{\mathcal{E}_0(t)}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$



Frecuencia de Rabi: $\Omega_R(t) \equiv \frac{d_{cv}\mathcal{E}_0(t)}{\hbar}$

Energía de la transición: $\Delta\epsilon \equiv \frac{E_{c,\mathbf{q}} - E_{v,\mathbf{q}}}{\hbar}$  Sistema de dos niveles

Detuning: $\delta \equiv \Delta\epsilon - \omega$ 

Análisis de las ecuaciones de Bloch ópticas

$$\left(\frac{d}{dt} + i\Delta\epsilon\right) P(t) = -\frac{i\Omega_R(t)}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) [n_c(t) - n_v(t)]$$

Evolución sin campo: $\Omega_R(t) = 0$

$$\left(\frac{d}{dt} + i\Delta\epsilon\right) P(t) = 0 \longrightarrow P(t) = P(0)e^{-i\Delta\epsilon t}$$

Introducimos nueva polarización “lenta”: $\tilde{P}(t) \equiv P(t)e^{i\omega t}$

Que pierde las oscilaciones rápidas: $\tilde{P}(t) \sim e^{-i(\Delta\epsilon - \omega)t} = e^{-i\delta t}$

Análisis de las ecuaciones de Bloch ópticas

Rotating-wave approximation

$$e^{-i\omega t} \left[\frac{d}{dt} + i(\Delta\epsilon - \omega) \right] \tilde{P}(t) = -\frac{i\Omega_R(t)}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) [n_c(t) - n_v(t)]$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{d}{dt} + i\delta \right) \tilde{P}(t) = -\frac{i\Omega_R(t)}{2} [n_c(t) - n_v(t)] \\ \frac{d}{dt} n_c(t) = -\frac{i\Omega_R(t)}{2} [\tilde{P}(t) - \tilde{P}^*(t)] \\ n_c(t) + n_v(t) = 1 \end{array} \right.$$

Vector de Bloch

Introducimos el vector de Bloch: $\mathbf{U}(t)$

$$\left\{ \begin{array}{l} U_1(t) = \left[\tilde{P}(t) + \tilde{P}^*(t) \right] = 2 \operatorname{Re} \left[\tilde{P}(t) \right] \\ U_2(t) = i \left[\tilde{P}(t) - \tilde{P}^*(t) \right] = -2 \operatorname{Im} \left[\tilde{P}(t) \right] \\ U_3(t) = n_c(t) - n_v(t) \end{array} \right.$$

Precesión del vector de Bloch

$$\frac{dU_1}{dt} = -\delta U_2$$

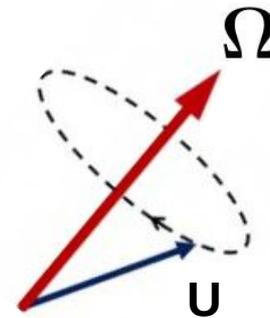
$$\frac{dU_2}{dt} = \delta U_1 + \Omega_R U_3$$

$$\frac{dU_3}{dt} = -\Omega_R U_2$$

$$\frac{d}{dt}\mathbf{U}(t) = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{U}$$

Precesión alrededor de:

$$\boldsymbol{\Omega} = -\Omega_R \hat{\mathbf{e}}_1 + \delta \hat{\mathbf{e}}_3$$

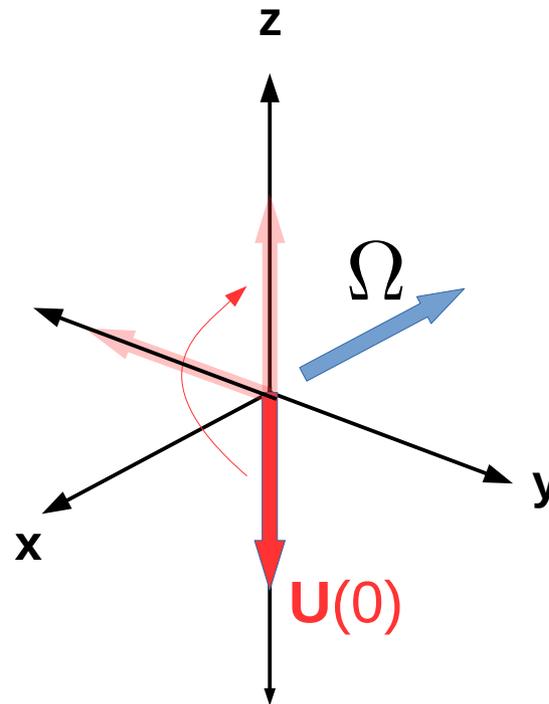


Esfera de Bloch: Rabi flops

Caso de resonancia:

$$\delta = 0 \longrightarrow \Omega = -\Omega_R \hat{e}_1$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dU_1}{dt} = 0 \\ \frac{dU_2}{dt} = \Omega_R U_3 \\ \frac{dU_3}{dt} = -\Omega_R U_2 \end{array} \right.$$



$$\frac{d}{dt}\mathbf{U}(t) = \Omega \times \mathbf{U}$$

Condición inicial:

$$n_c = 0, \quad n_v = 1$$
$$U_3(t = 0) = -1$$

Relajación y decoherencia

$$\frac{dU_1}{dt} = -\delta U_2 - \frac{U_1}{T_2}$$

$$\frac{dU_2}{dt} = \delta U_1 + \Omega_R U_3 - \frac{U_2}{T_2}$$

$$\frac{dU_3}{dt} = -\Omega_R U_2 - \frac{U_3 + 1}{T_1}$$

- Transiciones ópticas interbanda
- Ecuaciones de Bloch ópticas
- **Inclusión de interacción e-e, aproximación de campo medio:
ecuaciones de Bloch de semiconductores**

Excitación óptica con interacción electrón-electrón

Hamiltoniano de electrones: con red cristalina + interacción electrón-electrón:

$$H_{el} = \sum_{\mathbf{k}} (E_{c,\mathbf{k}} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} + E_{v,\mathbf{k}} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \left(a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} \right. \\ \left. + a_{v,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{v,\mathbf{k}} + 2 a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} \right)$$

$$H_{\text{int}} \simeq - \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(t) \left(d_{cv} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} + d_{vc} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} \right)$$

Ecuación de movimiento de la polarización interbanda:

$$i\hbar \frac{d}{dt} P_{vc,\mathbf{q}}(t) = [P_{vc,\mathbf{q}}(t), H_{el} + H_{\text{int}}]$$

Excitación óptica con interacción electrón-electrón

Ecuación de movimiento de la polarización interbanda:

$$\left[i\hbar \frac{d}{dt} - (E_{c,\mathbf{k}} - E_{v,\mathbf{k}}) \right] \hat{P}_{vc,\mathbf{k}} = (\hat{n}_{c,\mathbf{k}} - \hat{n}_{v,\mathbf{k}}) d_{cv} \mathcal{E}(t) + \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_q \left[\hat{a}_{c,\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{c,\mathbf{k}'} \hat{a}_{c,\mathbf{k}} + \hat{a}_{v,\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{v,\mathbf{k}'} \hat{a}_{c,\mathbf{k}} + \hat{a}_{v,\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{c,\mathbf{k}'} \hat{a}_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \hat{a}_{v,\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{v,\mathbf{k}'} \hat{a}_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right]$$

Estamos en problemas!

Random-Phase Approximation (RPA)

Paso 1:

$$\sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_q \hat{a}_{c, \mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{v, \mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{c, \mathbf{k}'} \hat{a}_{c, \mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_q \left(-\hat{a}_{c, \mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{c, \mathbf{k}'} \delta_{v, \mathbf{k}-\mathbf{q}; c, \mathbf{k}}^0 + \hat{a}_{c, \mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{c, \mathbf{k}} \hat{a}_{v, \mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{c, \mathbf{k}'} \right)$$

$$\mathbf{k}' + \mathbf{q} = \mathbf{k} \quad \longrightarrow \quad \approx \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_q \hat{n}_{c, \mathbf{k}} \hat{P}_{vc, \mathbf{k}-\mathbf{q}}$$

Paso 2:

$$\langle \hat{n}_{c, \mathbf{k}} \hat{P}_{vc, \mathbf{k}-\mathbf{q}} \rangle \approx \langle \hat{n}_{c, \mathbf{k}} \rangle \langle \hat{P}_{vc, \mathbf{k}-\mathbf{q}} \rangle = n_{c, \mathbf{k}} P_{vc, \mathbf{k}-\mathbf{q}}$$

Frecuencia de Rabi generalizada (renormalizada)

$$n_{c,\mathbf{k}} \underbrace{\frac{d_{cv}\mathcal{E}_0(t)}{\hbar}}_{\Omega_R} \longrightarrow n_{c,\mathbf{k}} \underbrace{\left[d_{cv}\mathcal{E}_0(t) + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} P_{vc,\mathbf{q}} \right]}_{\tilde{\Omega}_{R,\mathbf{k}}} \frac{1}{\hbar}$$

Frecuencia de Rabi
generalizada

Ecuaciones de Bloch de semiconductores

$$\left[i \frac{d}{dt} - \left(\tilde{E}_{c,\mathbf{k}} - \tilde{E}_{v,\mathbf{k}} \right) \right] P_{vc,\mathbf{k}} = (n_{c,\mathbf{k}} - n_{v,\mathbf{k}}) \tilde{\Omega}_{R,\mathbf{k}} + i \left. \frac{\partial P_{vc,\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{\text{colisiones}}$$

$$\frac{dn_{c,\mathbf{k}}}{dt} = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \left(\tilde{\Omega}_{R,\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}}^* \right) + \left. \frac{\partial n_{c,\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{\text{colisiones}}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{E}_{\lambda,\mathbf{k}} = E_{\lambda,\mathbf{k}} + \Sigma_{\text{exch},\lambda}(\mathbf{k}) = E_{\lambda,\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} n_{\lambda,\mathbf{q}} \\ \tilde{\Omega}_{R,\mathbf{k}} \equiv \frac{1}{\hbar} \left(d_{cv} \mathcal{E} + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} P_{\mathbf{q}} \right) \end{array} \right.$$

Resumen

- Transiciones ópticas interbanda en semiconductores:
modelo de dos bandas → sistemas de dos niveles
- Ecuaciones de Bloch ópticas
- Incluimos interacción e-e en aproximación de campo medio:
ecuaciones de Bloch de semiconductores: formalmente
análogo a caso de partícula única, con energías y
frecuencia de Rabi renormalizados dependientes del tiempo