Física de muchos cuerpos

DF-FCEN-UBA, Primer Cuatrimestre 2022

Guía 3: Operadores de campo y jellium model

1. Probar que el operador número

$$\hat{N} = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}(\mathbf{x})d^3x \tag{1}$$

conmuta con el Hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{ij} c_i^\dagger \langle i|T|j\rangle c_j + \frac{1}{2}\sum_{ijkl} c_l^\dagger c_j^\dagger \langle ij|V|kl\rangle c_l c_k, \tag{2}$$

tanto en el caso en que los operadores corresponden a bosones ($c^\dagger, c = b^\dagger, b$) como a fermiones ($c^\dagger, c = a^\dagger, a$) (Problema 1.1 del Fetter-Walecka).

2. (a) Escribir en segunda cuantización el Hamiltoniano de un gas de electrones quasi-bidimensional, cuyo Hamiltoniano en primera cuantización es:

$$H^{(1)} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i=1}^{N} u(z_i) \tag{3}$$

Sugerencia: Utilizar como base de partícula única los estados:

$$\psi_{n\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}, s) = \frac{1}{L} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}} \varphi_n(z)\chi_\sigma(s) \tag{4}$$

donde $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$ y $\varphi_n(z)$ satisface:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + u(z)\right]\varphi_n(z) = \varepsilon_n \varphi_n(z) \tag{5}$$

Ayuda:

$$\int d^2\rho \, \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{\rho^2 + (z-z')^2}} = \int_0^\infty d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \, \frac{\rho e^{iq\rho\cos\phi}}{\sqrt{\rho^2 + (z-z')^2}} \tag{6}$$

$$= 2\pi \int_0^\infty d\rho \, \frac{\rho J_0(q\rho)}{\sqrt{\rho^2 + (z-z')^2}} = \frac{2\pi}{q} e^{-q|z-z'|} \tag{7}$$

(b) Escribir en segunda cuantización el Hamiltoniano para el jellium model en dos dimensiones y obtenga una expresión equivalente a la Ec. (3.19) de Fetter-Walecka, es decir,

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{kpq}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} a^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1} a^{\dagger}_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\lambda_2} a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1} \tag{8}$$

.

3. Partiendo del Hamiltoniano obtenido en el problema 2(b) para el jellium model en dos dimensiones, continúe el análisis en forma análoga al realizado a partir de la Ec. (3.19) en el libro de Fetter y Walecka. El estudio consta de 4 pasos:

   (a) Adimensionalizar el Hamiltoniano y hacer un análisis como el que sigue a la Ec. (3.24).

   (b) Calcular el vector de Fermi como en (3.27) y la energía cinética como en (3.30).

   (c) Calcular el shift de energía a primer orden debido a la interacción Coulombiana, análogo a la Ec. (3.36).

   (d) Juntar los dos términos de la energía obtenidos [como en (3.37)]] y graficar como en la Fig. 3.2.

4. **Interacción espin-órbita en electrones confinados a quasi-2D**

   El Hamiltoniano de un electrón confinado en un pozo cuántico de semiconductores incluyendo las interacciones espin-órbita de Rashba y de Dresselhaus es

$$H_{RD} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + \alpha\left(k_y \sigma_x - k_x \sigma_y\right) + \beta\left(k_x \sigma_x - k_y \sigma_y\right). \tag{9}$$

   Los operadores momento (a menos de un $\hbar$) son $k_x = -i\frac{\partial}{\partial x}$ y $k_y = -i\frac{\partial}{\partial y}$. La masa efectiva de la banda de conducción es m^*, y α y β son parámetros que surgen del material y la forma del pozo cuántico. σ_x y σ_y son matrices de Pauli. El Hamiltoniano de Rashba-Dresselhaus puede ser resuelto analíticamente, y se obtienen las siguientes autoenergías y autofunciones [1]:

$$\psi_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} \frac{s(i\alpha e^{-i\varphi}+\beta e^{i\varphi})}{\delta\sqrt{1+\gamma\sin(2\varphi)}} \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{10}$$

$$E(\mathbf{k}, s) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + sk\delta\sqrt{1+\gamma\sin(2\varphi)}. \tag{11}$$

En estas expresiones $\mathbf{k}$ es el vector de onda bidimensional, φ es el ángulo de $\mathbf{k}$ en coordenadas polares, y A es la superficie de la muestra. El parámetro $\delta = \sqrt{\alpha^2+\beta^2}$ combina las constantes de Rashba y Dresselhaus. En cambio $\gamma = 2\alpha\beta/(\alpha^2+\beta^2)$ representa la competencia entre ambas interacciones y es máximo cuando $\alpha = \beta$. El número cuántico de espin $s = \pm 1$ denota autoestados con espin-up y spin-down con respecto al eje de cuantización de espín, que yace en el plano x-y y su ángulo polar ϕ obedece las relaciones

$$\sin\phi(\varphi) = -\frac{\alpha\cos(\varphi)+\beta\sin(\varphi)}{\delta\sqrt{1+\gamma\sin(2\varphi)}} \tag{12}$$

$$\cos\phi(\varphi) = \frac{\alpha\sin(\varphi)+\beta\cos(\varphi)}{\delta\sqrt{1+\gamma\sin(2\varphi)}} \tag{13}$$

Comentarios: A pesar de que la dirección de cuantización del espín varía con el orbital de partícula única, el estado fundamental de un gas de electrones con Hamiltoniano Rashba-Dresselhaus es paramagnético [2]. Además, notar que el Hamiltoniano de Rashba H_R, es invariante frente a la reversión temporal. Esto implica que $\psi_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r})$ y $\psi_{-\mathbf{k}s}(\mathbf{r})$ sean estados conjugados de Kramers con el mismo autovalor de energia $E(k, s)$ (Ref. [3]).

(a) Suponga que no está presente la interacción de Dresselhaus ($\beta = 0$) y verifique la solución del problema de autovalores de H_R.

(b) Ahora suponga que no está presente la interacción de Rashba ($\alpha = 0$) y verifique la solución del problema de autovalores de H_D.

(c) Grafique cualitativamente las energías de los autoestados de Rashba y describa la dirección de cuantización del espin.

(d) Escriba el Hamiltoniano H_R en segunda cuantización.

(e) Describa como se obtiene el estado fundamental de H_R. Trate de obtenerlo en función de la densidad de electrones bidimensional (típicamente $n \approx 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-2}$ hasta $n \approx 10^{12}\,\mathrm{cm}^{-2}$.

References

[1] E. I. Rashba, Sov. Phys. Solid State **2**, 1109 (1960). Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, JETP Lett. **39**, 78 (1984); J. Phys. C **17**, 6039 (1984).

[2] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Springer, Berlin, 2003).

[3] E. I. Rashba, Phys. Rev. B **68**, 241315(R) (2003).