

Física de muchos cuerpos/ Mecánica Cuántica de Muchas Partículas

DF-FCEN-UBA, Primer Cuatrimestre 2024

Guía 3: Operadores de campo y jellium model

1. Probar que el operador número

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

conmuta con el Hamiltoniano

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

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:

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

Sugerencia: Utilizar como base de partícula única los estados:

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

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

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

Ayuda:

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

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

(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,

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

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 espín-órbita en electrones confinados a quasi-2D

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

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

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 [?]:

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

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

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 espín $s = \pm 1$ denota autoestados con espín-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

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

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

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 [?]. 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 energía $E(k, s)$ (Ref. [?]).

- (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 espín.
- (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 $n \approx 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ hasta $n \approx 10^{12} \text{ cm}^{-2}$).

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).