Física de muchos cuerpos/
Mecánica Cuántica de Muchas Partículas

DF-FCEN-UBA, Primer Cuatrimestre 2024

Guía 4: Polarización interbanda y ecuaciones de Bloch ópticas y de semiconductores

1 Polarización interbanda

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

$$\hat{\mathbf{P}}(t) = \sum_s \int d^3r \, \hat{\Psi}_s^\dagger(\mathbf{r}, t) \, e\mathbf{r} \, \hat{\Psi}_s(\mathbf{r}, t), \tag{1}$$

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 $e\mathbf{r}$):

$$\mathbf{P}(t) = \sum_s \int d^3r \, \langle \hat{\Psi}_s^\dagger(\mathbf{r}, t) \, e\mathbf{r} \, \hat{\Psi}_s(\mathbf{r}, t) \rangle \tag{2}$$

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

$$\mathbf{P}(t) = \sum_{\mathbf{k}} P_{cv,\mathbf{k}}(t) d_{vc} + \text{c.c.} \tag{3}$$

2 Ecuaciones de Bloch ópticas

Ej. 5.1 del libro de Haug y Koch: Resolver las ecuaciones coherentes de Bloch para el caso resonante $\nu_{\mathbf{k}} = 0$ en la forma: $U_i(t) = \sum_{i,j} A_{ij}(t) U_j(0)$.

3 Ecuaciones de Bloch de Semiconductores

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

$$\begin{aligned} H_{el} &= \sum_{\mathbf{k}}(E_{c,k}a^{\dagger}_{c,\mathbf{k}}a_{c,\mathbf{k}} + E_{v,k}a^{\dagger}_{v,\mathbf{k}}a_{v,\mathbf{k}}) + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}\neq 0} V_q\Big(a^{\dagger}_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}a^{\dagger}_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}a_{c,\mathbf{k}'}a_{c,\mathbf{k}} \\ &+ a^{\dagger}_{v,\mathbf{k}+\mathbf{q}}a^{\dagger}_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}a_{v,\mathbf{k}'}a_{v,\mathbf{k}} + 2\,a^{\dagger}_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}a^{\dagger}_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}a_{v,\mathbf{k}'}a_{c,\mathbf{k}}\Big) \end{aligned} \tag{4}$$

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

$$H_d \simeq -\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(t)(a^{\dagger}_{c,\mathbf{k}}a_{v,\mathbf{k}}d_{cv} + h.c.) \tag{5}$$

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*:

$$\frac{\partial n_{c,\mathbf{k}}}{\partial t} = -2\mathrm{Im}\left(\Omega_{R,\mathbf{k}}P^{*}_{\mathbf{k}}\right), \tag{6}$$

donde utilizamos la frecuencia de Rabi generalizada

$$\Omega_{R,\mathbf{k}} \equiv \frac{1}{\hbar}\left(d_{cv}\mathcal{E} + \sum_{\mathbf{q}\neq\mathbf{k}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|}P_{\mathbf{q}}\right) \tag{7}$$