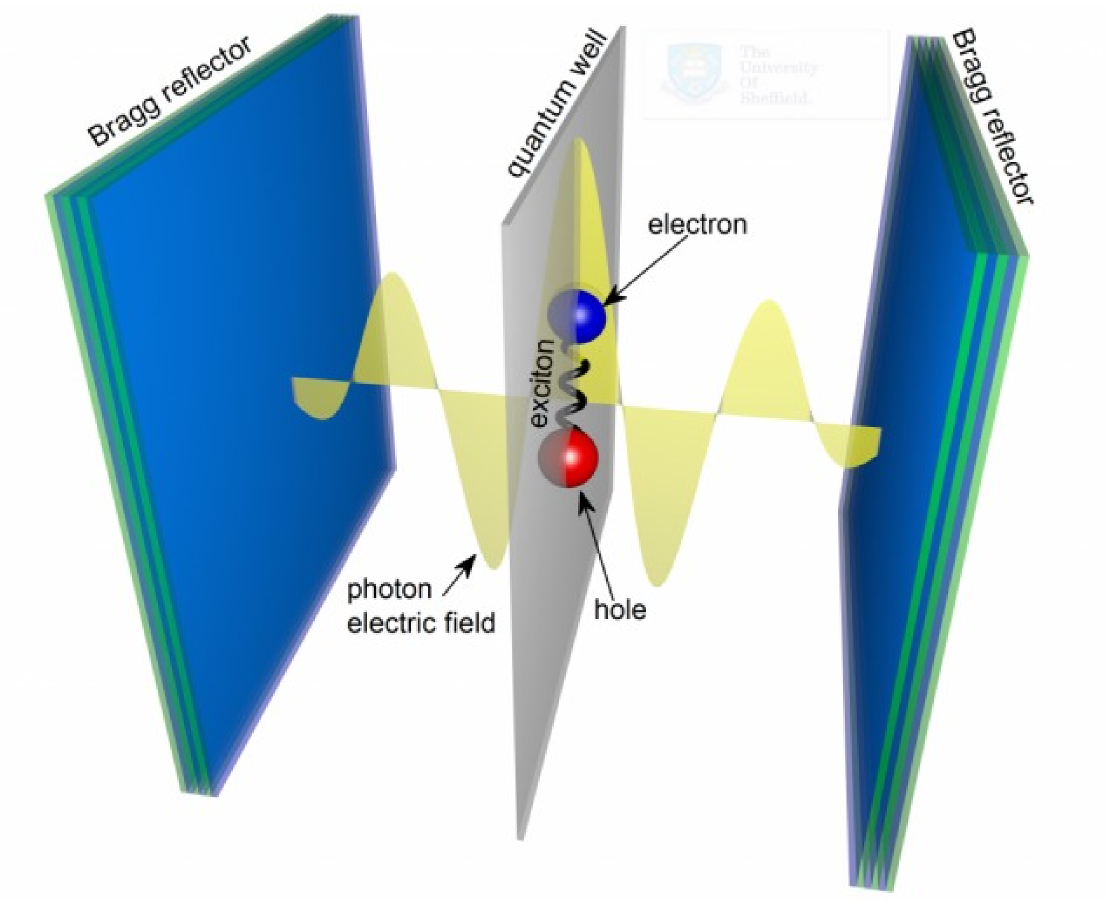
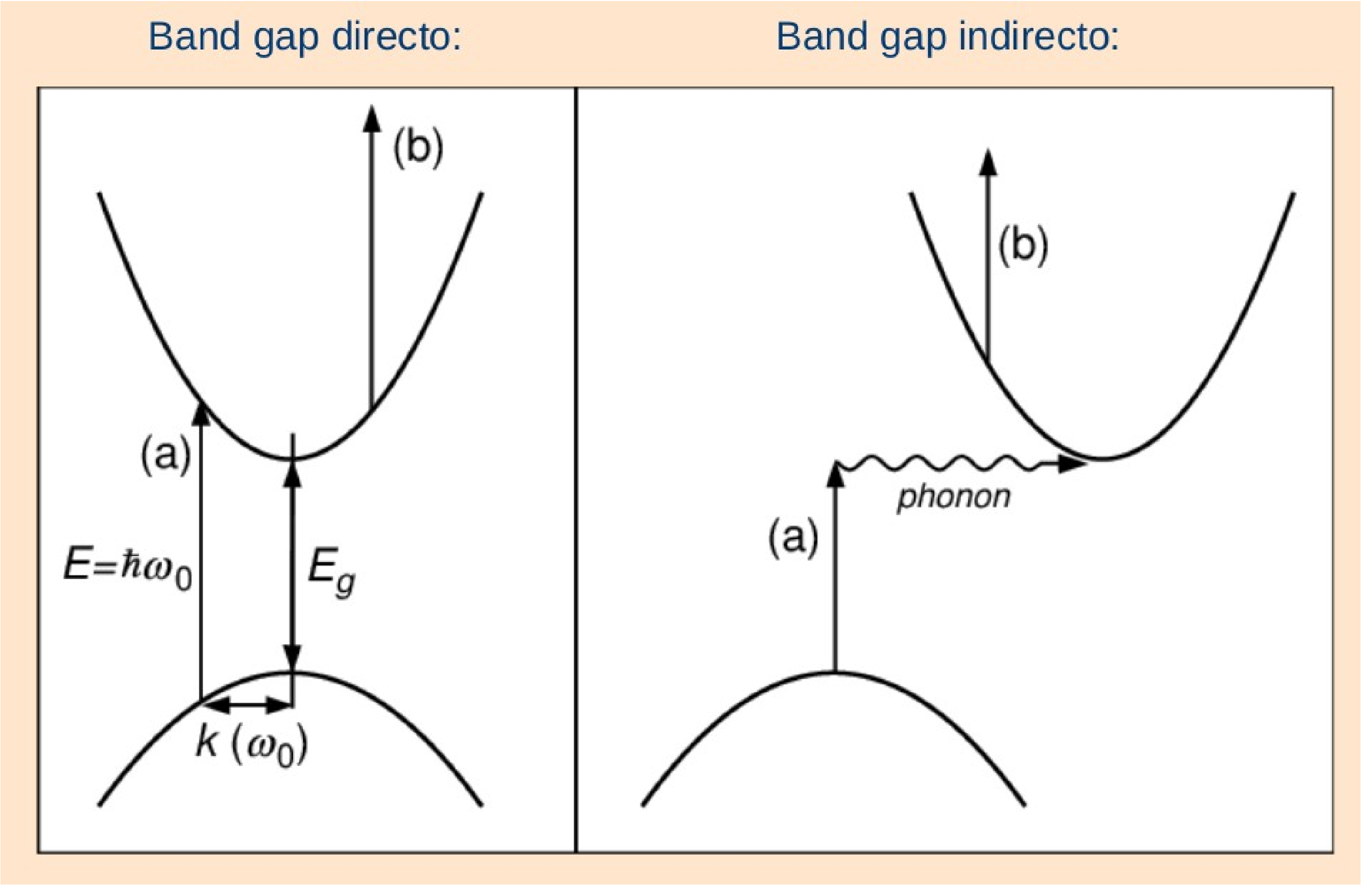
Teoría Hamiltoniana de polaritones



Transiciones ópticas en semiconductores



- En los semiconductores de gap directo, los excitones se acoplan fuertemente con los fotones.
- Para dar cuenta de este acoplamiento introducimos una nueva cuasipartícula, el polaritón.

Ecuación de movimiento de los excitones

- El sistema electrón-hueco es descripto por la ecuación Wannier.

$$-\left[\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m_r} + V(r)\right]\psi_\nu(\mathbf{r}) = E_\nu \psi_\nu(\mathbf{r})$$

- Obtenemos la descripción del excitón al incluir el movimiento del centro de masa

$$-\left[\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{R}}^2}{2M} + \frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m_r} + V(r)\right]\psi(\mathbf{R},\mathbf{r}) = E_{tot}\psi(\mathbf{R},\mathbf{r})$$ con, $$M = m_e + m_h$$

Como el centro de masa está libre $$\psi(\mathbf{R},\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{L^{3/2}}\psi(\mathbf{r})$$

Queremos escribir un Hamiltoniano que de cuenta del acoplamiento entre excitones y fotones.

Comencemos introduciendo un operador que nos permita crear excitones

Operador de creación de excitones

$$\left.\begin{aligned} \beta^{\dagger}_{-\mathbf{k},-s} &\equiv a_{v,\mathbf{k},s} \\ \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k},s} &\equiv a^{\dagger}_{c,\mathbf{k},s} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \begin{array}{c} \text{electron–hole pair operator} \\ \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}\beta^{\dagger}_{-\mathbf{k}'} \end{array}$$

El operador que describe la creación de un excitón en el estado ν con momento total $\mathbf{K}$ es

$$B^{\dagger}_{\nu,\mathbf{K}} = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\nu}(\mathbf{k} - \mathbf{K}/2)\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}\beta^{\dagger}_{\mathbf{K}-\mathbf{k}} \qquad (11.24)$$

completeness relation

$$\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} |\mathbf{k}, -\mathbf{k}'\rangle\langle\mathbf{k}, -\mathbf{k}'| = 1$$

$$\begin{aligned}
B^{\dagger}_{\nu,\mathbf{K}} &= |\nu\mathbf{K}\rangle\langle 0| \\
&= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} |\mathbf{k}, -\mathbf{k}'\rangle\langle\mathbf{k}, -\mathbf{k}'|\nu\mathbf{K}\rangle\langle 0| \\
&= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle\mathbf{k}, -\mathbf{k}'|\nu\mathbf{K}\rangle|\mathbf{k}, -\mathbf{k}'\rangle\langle 0| \\
&= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle\mathbf{k}, -\mathbf{k}'|\nu\mathbf{K}\rangle\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}\beta^{\dagger}_{-\mathbf{k}'} \quad .
\end{aligned}$$

Siendo,

$$\begin{aligned}
\langle\mathbf{k}, -\mathbf{k}'|\nu\mathbf{K}\rangle &= \int d^3r\, d^3r' \langle\mathbf{k}, -\mathbf{k}'|\mathbf{r}, \mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}, \mathbf{r}'|\nu\mathbf{K}\rangle \\
&= \int d^3r\, d^3r' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}\, e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{r}')/2}\psi_{\nu}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')
\end{aligned}$$

$$\langle \mathbf{k}, -\mathbf{k}' | \nu \mathbf{K} \rangle = \int d^3r\, d^3r' \langle \mathbf{k}, -\mathbf{k}' | \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' | \nu \mathbf{K} \rangle$$

$$= \int d^3r\, d^3r' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}\, e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{r}')/2} \psi_\nu(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

$$= \int d^3r \int d^3r' e^{-i\frac{(\mathbf{k}+\mathbf{k}')}{2}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \psi_\nu(\mathbf{r}-\mathbf{r}') e^{-i\frac{\mathbf{k}}{2}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\frac{\mathbf{k}}{2}\cdot\mathbf{r}'} e^{i\frac{\mathbf{k}'}{2}\cdot\mathbf{r}} e^{i\frac{\mathbf{k}'}{2}\cdot\mathbf{r}'} e^{i\frac{\mathbf{K}}{2}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}$$

$$= \int d^3(r+r') e^{i\frac{(\mathbf{K}-(\mathbf{k}-\mathbf{k}'))}{2}(\mathbf{r}+\mathbf{r}')} \int d^3(r-r') e^{-i\frac{(\mathbf{k}+\mathbf{k}')}{2}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \psi_\nu(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

$$= \delta[\mathbf{K} - (\mathbf{k}-\mathbf{k}')] \psi_\nu \left(\frac{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}{2} \right)$$

Resultando,

$$
\begin{aligned}
B^{\dagger}_{\nu,\mathbf{K}} &= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k}, -\mathbf{k}' | \nu \mathbf{K} \rangle \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}} \beta^{\dagger}_{-\mathbf{k}'} \\
&= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta\left[\mathbf{K} - (\mathbf{k} - \mathbf{k}')\right] \psi_{\nu} \left(\frac{\mathbf{k} + \mathbf{k}'}{2} \right) \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}} \beta^{\dagger}_{-\mathbf{k}'} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\nu}(\mathbf{k} - \mathbf{K}/2) \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}} \beta^{\dagger}_{\mathbf{K}-\mathbf{k}} \quad .
\end{aligned}
$$

De manera que el Hamiltoniano para excitones libres se puede escribir como,

$$
\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \hbar e_{\nu k} B^{\dagger}_{\nu,\mathbf{k}} B_{\nu,\mathbf{k}}.
$$

Lo que haremos ahora será introducir a los fotones y su interacción con los excitones en el formalismo

El Hamiltoniano de interacción

$$\mathcal{H}_I = -\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} d_{cv}\left[\alpha^\dagger_{\frac{1}{2}\mathbf{q}+\mathbf{k}}\beta^\dagger_{\frac{1}{2}\mathbf{q}-\mathbf{k}}\mathcal{E}(\mathbf{q})e^{-i\omega_q t} + \mathrm{h.c.}\right]$$

En donde q, el momento del fotón absorbido, es el momento intercambiado entre el electrón y el hueco creados.

Para poder expresarlo en términos de operadores excitónicos, consideremos

$$\begin{aligned}\sum_{\nu}\psi^*_\nu(\boldsymbol{\kappa})B^\dagger_{\nu,\mathbf{K}} &= \sum_{\nu\mathbf{k}}\psi^*_\nu(\boldsymbol{\kappa})\psi_\nu(\mathbf{k}-\mathbf{K}/2)\alpha^\dagger_{\mathbf{k}}\beta^\dagger_{\mathbf{K}-\mathbf{k}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}}\delta_{\boldsymbol{\kappa},\mathbf{k}-\mathbf{K}/2}\alpha^\dagger_{\mathbf{k}}\beta^\dagger_{\mathbf{K}-\mathbf{k}} = \alpha^\dagger_{\frac{1}{2}\mathbf{K}+\boldsymbol{\kappa}}\beta^\dagger_{\frac{1}{2}\mathbf{K}-\boldsymbol{\kappa}} \quad .\end{aligned}$$

De modo que,

$$\mathcal{H}_I = -\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\nu} d_{cv}\left[\psi_\nu(k)B^\dagger_{\nu,\mathbf{q}}\mathcal{E}(\mathbf{q})e^{-i\omega_q t} + \mathrm{h.c.}\right]$$

El Hamiltoniano de interacción

$$\mathcal{H}_I = -\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\nu} d_{cv}\left[\psi_\nu(k)B^\dagger_{\nu,\mathbf{q}}\mathcal{E}(\mathbf{q})e^{-i\omega_q t} + \text{h.c.}\right]$$

De la expresión para el potencial vector A en segunda cuantización, y de que,

$$\mathcal{E}(\mathbf{q},t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}A(\mathbf{q},t)$$

Se obtiene,

$$\mathcal{E}(\mathbf{q},t) = \mathcal{E}(\mathbf{q})e^{-i\omega_q t} = i\sqrt{2\pi\hbar\omega_q}(b_{\mathbf{q}} - \text{h.c.})$$ con, $$\begin{cases} b_{\mathbf{q}} & \text{photon annihilation operator} \\ \omega_q = \dfrac{cq}{\sqrt{\epsilon_0}} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \mathcal{H}_I = -i\hbar\sum_{\mathbf{q},\nu} g_{\nu\mathbf{q}}(B^\dagger_{\nu\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}} - \text{h.c.}) \\ \hbar g_{\nu\mathbf{q}} = d_{cv}\psi^*_\nu(\mathbf{r}=0)\sqrt{\pi\hbar\omega_q/2} \end{cases}$$

(Aprox. resonante)

El Hamiltoniano del sistema excitón - fotón

$$\mathcal{H}=\hbar\sum_{\mathbf{q}}\left[\sum_{\nu}e_{\nu q}B^{\dagger}_{\nu\mathbf{q}}B_{\nu\mathbf{q}}+\omega_{q}b^{\dagger}_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}-i\sum_{\nu}g_{\nu\mathbf{q}}(B^{\dagger}_{\nu\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}-\mathrm{h.c.})\right]$$

El Hamiltoniano de polaritones

El Hamiltoniano de polaritones

$$\mathcal{H} = \hbar \sum_{\mathbf{q}} \left[\sum_{\nu} e_{\nu q} B^{\dagger}_{\nu\mathbf{q}} B_{\nu\mathbf{q}} + \omega_q b^{\dagger}_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} - i \sum_{\nu} g_{\nu\mathbf{q}} (B^{\dagger}_{\nu\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} - \mathrm{h.c.}) \right]$$

Es posible diagonalizar este Hamiltoniano introduciendo operadores de creación de polaritones,

$$p_{\mathbf{q}} = u_{\mathbf{q}} B_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} \quad .$$

De manera que,

$$\mathcal{H} = \hbar \sum_{\mathbf{q}} \Omega_q p^{\dagger}_{\mathbf{q}} p_{\mathbf{q}} \quad .$$

Con $\Omega_{\mathbf{q}}$ el espectro de energías del polaritón.

El Hamiltoniano de polaritones

Para hallar coeficientes $u_{\mathbf{q}}$, $v_{\mathbf{q}}$ y el espectro del polaritón $\Omega_{\mathbf{q}}$,

Calculamos, $[p, H]/\hbar$ sobre el Hamiltoniano diagonalizado y sobre el mismo sin diagonalizar, igualamos y obtenemos que,

$$\Omega_{\mathbf{q}}(u_{\mathbf{q}}B_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}) = u_{\mathbf{q}}(e_{\mathbf{q}}B_{\mathbf{q}} - ig_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}) + v_{\mathbf{q}}(\omega_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}} + ig_{\mathbf{q}}B_{\mathbf{q}})$$

Agrupando los términos que acompañan a Bq por un lado, y los que acompañan a bq, por otro,

$$\left\{\begin{array}{l} 0 = (\Omega_{\mathbf{q}} - e_{\mathbf{q}})u_{\mathbf{q}} + ig_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{q}} \\ 0 = -ig_{\mathbf{q}}u_{\mathbf{q}} + (\Omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}})v_{\mathbf{q}} \end{array}\right. \Longrightarrow (\Omega_{\mathbf{q}} - e_{\mathbf{q}})(\Omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}) - g_{\mathbf{q}}^2 = 0$$

Espectro del polaritón

$$(\Omega_{\mathbf{q}} - e_{\mathbf{q}})(\Omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}) - g_{\mathbf{q}}^2 = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad \boldsymbol{\Omega_{q,1,2} = \frac{1}{2}(e_q + \omega_q) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(e_q - \omega_q)^2 + 4g_q^2}}$$

En donde 1 y 2 corresponden a las ramas superior e inferior que encontramos cuando estudiamos el problema desde el análisis de la función dieléctrica

Finalmente,

$$\mathcal{H} = \hbar \sum_{\mathbf{q}, i=1,2} \Omega_{i,q} p_{i,\mathbf{q}}^{\dagger} p_{i,\mathbf{q}}$$

La reflexión del Profesor Haug

If we compare the dielectric formalism used at the beginning of this chapter with the diagonalization procedure of this section, we see that an advantage of the first approach is that it allows us quite naturally to include the damping of the modes.

¡Muchas Gracias!

¿Preguntas?