



ECUACIONES DE BLOCH EN SEMICONDUCTORES

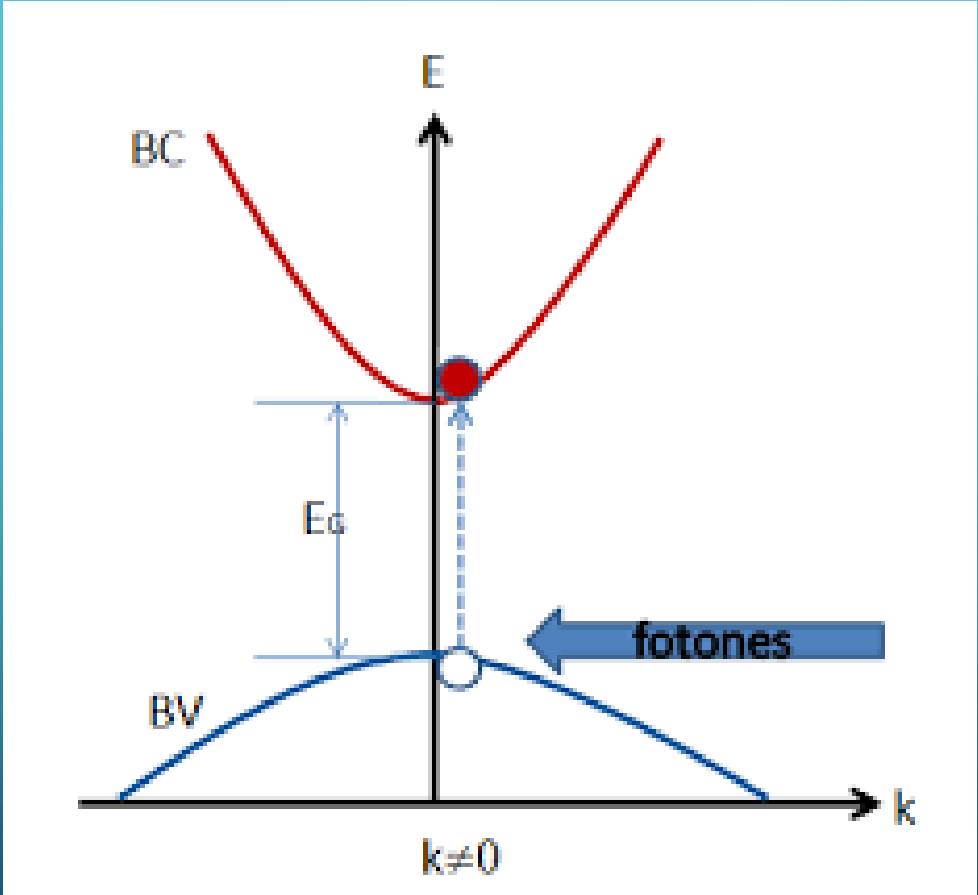
Luis Alfredo Martínez

Becario Post-doctoral UTN

Fenómenos Colectivos en Sólidos

Prof. Pablo Tamborenea. Universidad de
Buenos Aires

INTRODUCCIÓN



INTRODUCCIÓN

Transiciones ópticas dipolares

- 1) Enfoque de portadores libres en estados cuánticos puros (cap 2 de Haug y Koch)
- 2) Enfoque de portadores libres en estados cuánticos mezclados, vía matriz densidad (cap 5 de Haug y Koch)
- 3) Enfoque de par electrón-hueco de baja densidad tomando en cuenta la interacción Coulombiana usando segunda cuantización (cap 10 Haug y Koch)
- 4) Enfoque de par electrón hueco de alta densidad (régimen no lineal) tomando en cuenta la interacción Coulombiana (cap 12 Haug y Koch)

ENFOQUE DE PORTADORES LIBRES: ESTADOS MEZCLADOS

$|\lambda\mathbf{k}\rangle$



Estados de Dirac

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

$$\sum_{\lambda\mathbf{k}} |\lambda\mathbf{k}\rangle\langle\lambda\mathbf{k}| = 1 .$$

$|\lambda\mathbf{k}\rangle$

Autoestados de

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r})$$

ENFOQUE DE PORTADORES LIBRES: ESTADOS MEZCLADOS

$$\mathcal{H}_0|\lambda\mathbf{k}\rangle = E_\lambda(\mathbf{k})|\lambda\mathbf{k}\rangle = \hbar\epsilon_{\lambda,\mathbf{k}}|\lambda\mathbf{k}\rangle .$$

Transformando a ecuación de Schrodinger en el espacio de las posiciones se tiene la función de onda cuántica que es la función de Bloch

$$\psi_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \lambda\mathbf{k} \rangle ,$$

$$\psi_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{L^{3/2}} u_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r})$$

ENFOQUE DE PORTADORES LIBRES: ESTADOS MEZCLADOS

Puede escribirse en la representación diagonal el término de energía cinética quedando

$$\mathcal{H}_0 = \hbar \sum_{\lambda \mathbf{k}} \epsilon_{\lambda, \mathbf{k}} |\lambda \mathbf{k}\rangle \langle \lambda \mathbf{k}| .$$

El término de interacción viene dado por:

$$\mathcal{H}_I = -er \mathcal{E}(t) = -d \mathcal{E}(t) ,$$

ENFOQUE DE PORTADORES LIBRES: ESTADOS MEZCLADOS

En la representación diagonal quedaría:

$$\mathcal{H}_I = -e\mathcal{E}(t) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \lambda, \lambda'} r_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) |\lambda'\mathbf{k}'\rangle \langle \lambda\mathbf{k}|$$

$$r_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \langle \lambda'\mathbf{k}' | r | \lambda\mathbf{k} \rangle .$$

Sin entrar en detalles de las cuentas, se asume solo transiciones interbandas y se expanden las funciones de Bloch utilizando las funciones u . La aproximación dipolar también es utilizada (se ignora el momento del foton con respecto al momento del electron en la ZB).

ENFOQUE DE PORTADORES LIBRES: ESTADOS MEZCLADOS

$$er_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = d_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} d_{\lambda'\lambda}(0) \frac{\epsilon_{\lambda',0} - \epsilon_{\lambda,0}}{\epsilon_{\lambda',\mathbf{k}} - \epsilon_{\lambda,\mathbf{k}}},$$

Con:

$$d_{\lambda'\lambda}(0) = \frac{ie\mathbf{p}_{\lambda'\lambda}(0)}{m_0(\epsilon_{\lambda',0} - \epsilon_{\lambda,0})}.$$

ENFOQUE DE PORTADORES LIBRES: ESTADOS MEZCLADOS

En el caso de dos bandas parabólicas con masas efectivas distintas se tiene la relación

$$\hbar\epsilon_{\lambda',\mathbf{k}} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\lambda'}} \quad \text{and} \quad \hbar\epsilon_{\lambda,\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\lambda}} ,$$

El elemento de matriz dipolar óptica es, con estas consideraciones

$$\mathbf{d}_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \mathbf{d}_{\lambda'\lambda}(0) \frac{E_g}{E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_{\lambda}} + \frac{1}{m_{\lambda'}} \right)} .$$

ENFOQUE DE PORTADORES LIBRES: ESTADOS MEZCLADOS

Ahora consideraremos la aproximación de dos bandas, restringiendo el tratamiento a la banda de valencia y de conducción, se ignorará también la dependencia de \mathbf{k} en el elemento de matriz dipolar, de tal manera que el Hamiltoniano de interacción queda:

$$\mathcal{H}_I = -\mathcal{E}(t) \sum_{\mathbf{k}, \{\lambda \neq \lambda'\} = \{c, v\}} d_{\lambda'\lambda} |\lambda'\mathbf{k}\rangle \langle \lambda\mathbf{k}| \equiv \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{I,\mathbf{k}} ,$$

$$\mathcal{H}_{I,\mathbf{k}} = -\mathcal{E}(t) (d_{cv} |c\mathbf{k}\rangle \langle v\mathbf{k}| + d_{cv}^* |v\mathbf{k}\rangle \langle c\mathbf{k}|) ,$$

$$d_{cv}^* = d_{vc}$$

ENFOQUE DE PORTADORES LIBRES ESTADOS MEZCLADOS

Por conveniencia se escribe en la representación de interacción al Hamiltoniano . También escribimos la matriz densidad de partícula única en esta representación.

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{I,\mathbf{k}}^{int}(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right) \mathcal{H}_{I,\mathbf{k}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right) \\ &= -\mathcal{E}(t) \left[e^{i(\epsilon_{c,\mathbf{k}} - \epsilon_{v,\mathbf{k}})t} d_{cv} |c\mathbf{k}\rangle \langle v\mathbf{k}| + h.c. \right]\end{aligned}$$

$$\rho_{\mathbf{k}}^{int}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right) \rho_{\mathbf{k}}(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right)$$

$$\rho_{\mathbf{k}} = \sum_{\lambda',\lambda} \rho_{\lambda',\lambda}(\mathbf{k}, t) |\lambda'\mathbf{k}\rangle \langle \lambda\mathbf{k}| .$$

ENFOQUE DE PORTADORES LIBRES: ESTADOS MEZCLADOS

La ecuación de movimiento para la matriz densidad es la ecuación de Liouville

$$\frac{d}{dt}\rho_{\mathbf{k}}^{int}(t) = -\frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}_{I,\mathbf{k}}^{int}, \rho_{\mathbf{k}}^{int}(t)]$$

Sacando las cuentas respectivas se obtiene una expresión a la que luego puede “sanducharse” para tomar los elementos de matriz de la matriz densidad en la representación de interacción

$$\rho_{cv}^{int}(\mathbf{k}, t) = \langle c\mathbf{k} | \rho_{\mathbf{k}}^{int}(t) | v\mathbf{k} \rangle$$

ENFOQUE DE PORTADORES LIBRES: ESTADOS MEZCLADOS

De ese proceso de cálculo se obtiene las ecuaciones de Bloch ópticas

$$\frac{d}{dt}\rho_{cv}^{int}(\mathbf{k}, t) = \frac{i}{\hbar}d_{cv}\mathcal{E}(t)e^{i(\epsilon_{c,\mathbf{k}}-\epsilon_{v,\mathbf{k}})t}[\rho_{vv}(\mathbf{k}, t) - \rho_{cc}(\mathbf{k}, t)]$$

Los elementos diagonales de la matriz densidad constituyen un sistema de ecuaciones acopladas.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\rho_{cc}(\mathbf{k}, t) &= \frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t) \left[d_{cv}e^{i(\epsilon_{c,\mathbf{k}}-\epsilon_{v,\mathbf{k}})t}\rho_{vc}^{int}(\mathbf{k}, t) - c.c. \right] , \\ \frac{d}{dt}\rho_{vv}(\mathbf{k}, t) &= \frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t) \left[d_{cv}^*e^{i(\epsilon_{v,\mathbf{k}}-\epsilon_{c,\mathbf{k}})t}\rho_{cv}^{int}(\mathbf{k}, t) - c.c. \right] \\ &= -\frac{d}{dt}\rho_{cc}(\mathbf{k}, t) .\end{aligned}$$

ENFOQUE DE PAR ELECTRÓN-HUECO DE ALTA DENSIDAD

Utilizamos acá la segunda cuantización, considerando la interacción de Coulomb.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_I$$

Está escrito bajo la aproximación de dos bandas exclusivamente.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{el} = & \sum_{\mathbf{k}} (E_{c,\mathbf{k}} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} + E_{v,\mathbf{k}} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} (a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} + a_{v,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{v,\mathbf{k}} \\ & + 2a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}}) \end{aligned}$$

ENFOQUE DE PAR ELECTRÓN-HUECO DE ALTA DENSIDAD

$$\mathcal{H}_I = - \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(t) (a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} d_{cv} + h.c.)$$

Utilizando el operador de hueco introducido en el cap. 11 del Haug y Koch para los polaritones e indica la destrucción de un electrón en la banda de valencia y la creación de un hueco con momento y espín opuestos

$$\beta_{-\mathbf{k}}^\dagger = a_{v,\mathbf{k}}$$

$$\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger = a_{c,\mathbf{k}}^\dagger$$

Ignoramos el spin

ENFOQUE DE PAR ELECTRÓN-HUECO DE ALTA DENSIDAD

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}} (E_{e,\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + E_{h,\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} (\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}'} \beta_{\mathbf{k}} - 2\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}}) \\ & - \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(t) (d_{cv} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger + \text{h.c.}) , \end{aligned} \quad (12.6)$$

Las energías de los electrones y huecos viene dadas por

$$E_{e,\mathbf{k}} = E_{c,\mathbf{k}} = \hbar \epsilon_{e,\mathbf{k}}$$

$$E_{h,\mathbf{k}} = -E_{v,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} = \hbar \epsilon_{h,\mathbf{k}}$$

ENFOQUE DE PAR ELECTRÓN-HUECO DE ALTA DENSIDAD

Se tiene por objetivo derivar las ecuaciones de movimiento de los elementos de matriz reducida de la densidad de electrones, de los huecos y de la polarización

$$\begin{aligned}\langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle &= n_{e,\mathbf{k}}(t) \\ \langle \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} \rangle &= n_{h,\mathbf{k}}(t) \\ \langle \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \rangle &= P_{he}(\mathbf{k}, t) \equiv P_{\mathbf{k}}(t)\end{aligned}$$

Lo cual resulta para cada uno las siguientes formulas

ENFOQUE DE PAR ELECTRÓN-HUECO DE ALTA DENSIDAD

$$\begin{aligned} \hbar \left[i \frac{d}{dt} - (\epsilon_{e,k} + \epsilon_{h,k}) \right] P_{\mathbf{k}} &= (n_{e,\mathbf{k}} + n_{h,\mathbf{k}} - 1) d_{vc} \mathcal{E}(t) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \left(\langle \alpha_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}} \rangle - \langle \beta_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}} \rangle \right. \\ &\left. + \langle \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \rangle - \langle \beta_{-\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \rangle \right) , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hbar \frac{\partial}{\partial t} n_{e,\mathbf{k}} &= -2 \operatorname{Im} \left[d_{cv} \mathcal{E}(t) P_{\mathbf{k}}^* \right] \\ &+ i \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \left(\langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k}'} \rangle - \langle \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}'} \rangle \right. \\ &\left. + \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}'} \rangle - \langle \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}'} \rangle \right) , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hbar \frac{\partial}{\partial t} n_{h,\mathbf{k}} &= -2 \operatorname{Im} \left[d_{cv} \mathcal{E}(t) P_{\mathbf{k}}^* \right] \\ &+ i \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \left(\langle \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k}'} \rangle - \langle \beta_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}'} \rangle \right. \\ &\left. + \langle \alpha_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'} \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle - \langle \alpha_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'} \beta_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} \rangle \right) . \end{aligned}$$

ENFOQUE DE PAR ELECTRÓN-HUECO DE ALTA DENSIDAD

Se separan ambas ecuaciones en dos partes: la de Hartree Fock y la de scattering

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle_{HF} + \frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle \Big|_{scatt}$$

$$\frac{\partial P_{\mathbf{k}}}{\partial t} = -i(e_{e,\mathbf{k}} + e_{h,\mathbf{k}})P_{\mathbf{k}} \quad (12.14)$$

$$- \frac{i}{\hbar} (n_{e,\mathbf{k}} + n_{h,\mathbf{k}} - 1) \left[d_{cv}\mathcal{E}(t) + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} P_{\mathbf{q}} \right] + \frac{\partial P_{\mathbf{k}}}{\partial t} \Big|_{scatt},$$

$$\frac{\partial n_{e,\mathbf{k}}}{\partial t} = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \left\{ \left[d_{cv}\mathcal{E}(t) + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} P_{\mathbf{q}} \right] P_{\mathbf{k}}^* \right\} + \frac{\partial n_{e,\mathbf{k}}}{\partial t} \Big|_{scatt}, \quad (12.15)$$

$$\frac{\partial n_{h,\mathbf{k}}}{\partial t} = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \left\{ \left[d_{cv}\mathcal{E}(t) + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} P_{\mathbf{q}} \right] P_{\mathbf{k}}^* \right\} + \frac{\partial n_{h,\mathbf{k}}}{\partial t} \Big|_{scatt}, \quad (12.16)$$

ENFOQUE DE PAR ELECTRÓN-HUECO DE ALTA DENSIDAD

Introduciendo la frecuencia de Rabi generalizada podemos obtener las ecuaciones de Bloch de semiconductores

$$\omega_{R,k} = \frac{1}{\hbar} \left(d_{cv} \mathcal{E} + \sum_{q \neq k} V_{|k-q|} P_q \right)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_k}{\partial t} &= -i(e_{e,k} + e_{h,k})P_k - i(n_{e,k} + n_{h,k} - 1)\omega_{R,k} + \left. \frac{\partial P_k}{\partial t} \right|_{scatt} \\ \frac{\partial n_{e,k}}{\partial t} &= -2 \operatorname{Im}(\omega_{R,k} P_k^*) + \left. \frac{\partial n_{e,k}}{\partial t} \right|_{scatt} \\ \frac{\partial n_{h,k}}{\partial t} &= -2 \operatorname{Im}(\omega_{R,k} P_k^*) + \left. \frac{\partial n_{h,k}}{\partial t} \right|_{scatt} . \end{aligned} \quad (12.19)$$

$$\frac{d n_{c\vec{k}}}{dt} = \frac{iE(t)}{\hbar} d_{cv} (P_{cv, \vec{k}} - P_{vc, \vec{k}})$$



GRACIAS