

**Oscilaciones de Rabi en la excitación
óptica de semiconductores:
Efectos de muchos cuerpos**

Stutz, Esteban Eric

Tesis de grado de Licenciatura en Ciencias Físicas

Depto. de Física - FCEN - UBA

Agosto 2025

ALUMNO:

Stutz, Esteban Eric - LU N° 253/11 - *ee.stutz.88@gmail.com*.

LUGAR DE TRABAJO:

Depto. de Física, Facultad de Cs. Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires.
Pabellón I, Ciudad Universitaria (1428), Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.

DIRECTOR:

Dr. Tamborenea, Pablo Ignacio - *pablot@df.uba.ar*.

Resumen

En el presente trabajo se estudiaron las oscilaciones de Rabi generadas por la excitación externa de un campo eléctrico hacia un medio semiconductor cuasi-unidimensional. El fenómeno se basa en la promoción de electrones de la banda valencia hacia la banda de conducción del medio, siendo éste un problema de muchos cuerpos interactuantes entre sí (por Coulomb) y con la excitación externa, vía interacción dipolar eléctrica, las cuales producen transiciones únicamente interbanda: $|v, k\rangle \longleftrightarrow |c, k\rangle$ ("v" por banda de valencia, "c" por conducción, k cuasi-momento). Para el trabajo se consideraron modelos que iban de menos a más complejidad, detallando cualitativa y cuantitativamente los cambios en la medida que se agregaban variables a considerar: modelo de portadores de carga no interactuantes entre sí (PNI) y modelo de portadores de carga interactuantes entre sí (PI). El PNI consistió en ignorar la interacción coulombiana entre electrones promovidos a la banda de conducción; el segundo en considerarla. El punto de partida común de ambos fue el hamiltoniano del sistema, llegándose a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias en el tiempo para las cantidades $n_{e,k}(t)$, $n_{h,k}(t)$, $P_k(t)$ que son, respectivamente, densidad de electrones promovidos a la banda de conducción, densidad de huecos en banda de valencia y polarización interbanda. El sistema de ecuaciones en cuestión son un caso particular de las Ecuaciones de Semiconductor de Bloch (SBE).

Se partió del estudio de una partícula en un sistema de dos niveles, la cual interactuaba con un campo eléctrico mediante aproximación dipolar, observándose las oscilaciones de Rabi y estudiando sus variaciones en amplitud y frecuencia en función de la sintonización entre frecuencia del campo y frecuencia asociada a la energía de transición entre estados. Se tuvo que a mayor $\Delta\omega$ (desintonía o *detuning*) menor amplitud de oscilación y mayor frecuencia de la misma. Basándose en esto y en el hecho de que en el problema de muchos cuerpos las transiciones debido al campo eléctrico son interbanda, se pudo caracterizar bajo el modelo PNI a los electrones del semiconductor como a un conjunto de problemas de partícula única en sistema de dos niveles, un problema individual por cada cuasi-momento k (en todo el trabajo se incluyó al índice de spin dentro del de cuasi-momento). Además, el problema abordado por el modelo PNI pudo ser resuelto en forma exacta; en cambio, al considerar la interacción coulombiana entre partículas cargadas (modelo PI) se llegó a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, las cuales fueron resueltas en forma numérica por el método de Runge-Kutta 4 (RK4).

Los resultados obtenidos del modelo PI difieren de los del PNI debido a la aparición de términos de energía que obligan a renormalizar ciertas cantidades, entre ellas las *self-energies* $\Sigma_{e,k}$, $\Sigma_{h,k}$, agentes que causan el corrimiento energético entre bandas de valencia y conducción en la medida que aparecen más huecos y electrones, respectivamente, en dichas bandas. La self-energy máxima por estado fue calculada, arrojando $\Sigma_{max} \approx 4$ meV. Estas self-energies son, a su vez, las responsables de la aparición de detuning variable en zonas donde el modelo PI predecía valores fijos, lo que permite las oscilaciones de Rabi completas

hasta un $|k|$ máximo que fue calculado: seteando parámetros para tener detuning nulo en $k = 0$, luego $|k| = 1,098 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA}$. Por último, las diferencias entre modelos más acuciantes resultaron ser:

- cambios en el patrón de oscilaciones de Rabi (armónicas para PNI, anarmónicas para PI);
- aumento del ancho del intervalo de cuasi-momentos en donde se tienen oscilaciones significativas;
- cambios en el patrón de valores medios temporales de densidad de población, pasando de un comportamiento de máximo en zona de detuning nulo y decaimiento monótono al alejarse (PI) a uno con máximos absolutos desplazados y, entre ellos, un juego alternado de máximos y mínimos locales (PNI).
- aumento de densidad electrónica por unidad de longitud y de polarización por unidad de longitud, además de cambios de comportamiento oscilatorio (cuasi-armónico para PNI, anarmónico para PI).

Agradecimientos

De una forma resumida, me gustaría mencionar a quienes en mayor o menor medida hicieron posible que hoy, grande y ya con familia, haya podido llegar a esta instancia:

- Gracias a mis padres, por haberme dado la vida, amado, criado, inculcado la cultura del estudio y del esfuerzo; por haberme apoyado incluso sin haber estado de acuerdo en mi afán de emprender ésta, que fue para mí, una muy larga carrera.
- Gracias a mis profesores de FCEN-UBA; son la imagen en la cual deseo reflejarme. Todos de excelencia, imposibles de ser medidos en alguna especie de ranking: su saber, su profesionalismo, su vocación hicieron que cada clase, a pesar de uno llegar cansado de trabajar y habiendo recorrido largas distancias, valiera la pena. Nunca viví mi carrera como un sacrificio; hasta el último día, ya de grande y con familia, me sentí como un aprendiz de filósofo griego dejándose llevar por el asombro y la inagotable sed de saber.
- Gracias a nuestra querida facultad toda, una auténtica Biblioteca de Alejandría en plena *terra australis*; un lugar que me inspiró hasta en esas tardes de café con mis compañeros, meriendas convertidas en ateneos.
- Gracias a los compañeros con los que he compartido mañanas, tardes, noches, fines de semana, jornadas de estudio, ayuda en ambos sentidos, nervios, abrazos, alegrías; ojalá estén todos bien y les haya ido bien en la vida.
- Gracias a Cristina Caputo por ayudarme en el último tramo de mi carrera; su acompañamiento fue crucial para recibir ese último empujón necesario para llegar a la otra orilla del río.
- Gracias a mi bella mujer, Olexandra, por su infinito cariño, por su lealtad, por apoyarme incondicionalmente en esta larga travesía, por darme ánimos cuando perdía el impulso, por ser mi soporte fundamental en todo esto. Gracias, además, por la familia hermosa que hemos constituido: Alessia y Bebé II (en camino).
- Gracias a mi director Pablo Tamborenea: su infinita paciencia, su pedagogía, su acompañamiento, su agradable personalidad. Volviendo a la metáfora de la orilla del río: él es el carpintero que me enseñó a construir el bote. Y ojalá disfrute de este trabajo, este pequeño pergamino que quiero aportar a nuestra Biblioteca de Alejandría austral.

Índice

1. Introducción	1
1.1. Interacción semi-clásica entre átomo de dos niveles y campo eléctrico . . .	1
1.2. Transiciones ópticas dipolares en semiconductores	10
1.2.1. Hamiltoniano de interacción dipolar luz-semiconductor	10
1.2.2. Transiciones ópticas interbanda: dinámica de la matriz densidad . .	14
1.2.3. Excitación óptica monocromática a portadores no interactuantes . . .	16
1.2.4. Transiciones de portadores interactuantes	17
1.2.5. Excitación óptica monocromática a portadores interactuantes	26
2. Modelo de portadores no interactuantes entre sí	28
2.1. Solución exacta	28
2.2. Caso unidimensional	29
3. Modelo de portadores interactuantes entre sí	31
3.1. Estimación de self-energies a partir de caso de distribución conocida: Fermi-Dirac en cuasi-1D	31
3.1.1. Aproximación de la interacción coulombiana por campo medio . . .	32
3.1.2. Efecto de la self-energy en la aparición de detuning: comparación con sistema de dos niveles	36
3.2. Caso distribución cualquiera en cuasi-1D	39
4. Análisis y comparación entre modelos	43
4.1. Ancho de sintonía significativa	43
4.2. Comportamiento oscilatorio en cuasi-momento de máxima sintonización inicial	44
4.3. Estudio de amplitudes de oscilación dentro del intervalo de sintonía significativa	46
4.4. Densidad electrónica y polarización por unidad de longitud	50
5. Conclusiones	52
5.1. Problema de única partícula en sistema de dos niveles	52
5.2. Problema many-body de portadores no interactuantes entre sí	53
5.3. Problema many-body de portadores interactuantes entre sí	53
6. Propuestas a futuro	55
A. Apéndice	56
A.1. Demostración identidad $d_{cv} = d_{vc}^*$	56
A.2. Inversión de población $W(t)$ en sistema de dos niveles	56

A.3. Dipolo eléctrico $p(t)$ en sistema de dos niveles	57
A.4. Relación entre valores de expectación de operadores x y p	58
A.5. Operador \mathbf{p} aplicado a $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_\lambda(\mathbf{0};\mathbf{r})$	59
A.6. Ecuación de Liouville-Von Neumann para $\rho(t)$	59
A.7. Sistema de ecuaciones diferenciales para los $\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}, t)$	59
A.8. Operadores en segunda cuantización	61
A.8.1. Operadores de 1 partícula	62
A.8.2. Operadores de 2 partículas	62
A.8.3. Operadores de campo	63
A.9. Ecuación de Heisenberg para operador número	63
A.9.1. Resolución término de energía cinética	64
A.9.2. Resolución término de interacción dipolar	64
A.9.3. Resolución del término de energía potencial electrostática	65
A.10. Solución exacta a modelo de portadores no interactuantes entre sí	68
A.11. Transformada de Fourier de $V(z)$ en caso cuasi-1D	70

1. Introducción

1.1. Interacción semi-clásica entre átomo de dos niveles y campo eléctrico

Sea un electrón (carga e y masa m_0) ligado a un núcleo atómico que forma un sistema de dos niveles de energía ϵ_v , ϵ_c , con estados asociados $|v\rangle$, $|c\rangle$, respectivamente, auto-estados del siguiente hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}), \quad (1.1.1)$$

siendo $V(\mathbf{r})$ el potencial de interacción coulombiano entre núcleo atómico y electrón, considerando el núcleo centrado en el origen.

Se define:

$$\omega_{cv} := \frac{\epsilon_c - \epsilon_v}{\hbar}, \quad (1.1.2)$$

asumiendo que $|v\rangle$ corresponde al *ground state* y $|c\rangle$ al nivel *excited*.

Se considera la incidencia de un campo eléctrico $\mathbf{E}(t; \mathbf{r})$ bajo aproximación dipolar [1], lo cual modifica al \mathcal{H}_0 de la Ec. (1.1.1) generando un nuevo hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I, \quad (1.1.3)$$

siendo:

$$\mathcal{H}_I = -e \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t), \quad (1.1.4)$$

observando que bajo esta aproximación se da que $\mathbf{E}(t; \mathbf{r}) \approx \mathbf{E}(t; \mathbf{0}) =: \mathbf{E}(t)$. Definiendo el dipolo eléctrico $\mathbf{d} := e \mathbf{r}$, el hamiltoniano \mathcal{H}_I queda:

$$\mathcal{H}_I = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(t). \quad (1.1.5)$$

Para representar \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}_I en base $\{|c\rangle; |v\rangle\}$, se considera:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= id \mathcal{H}_0 id = (|v\rangle \langle v| + |c\rangle \langle c|) \mathcal{H}_0 (|v\rangle \langle v| + |c\rangle \langle c|), \\ \implies \mathcal{H}_0 &= \epsilon_v |v\rangle \langle v| + \epsilon_c |c\rangle \langle c|. \end{aligned} \quad (1.1.6)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_I &= id \mathcal{H}_I id = (|v\rangle \langle v| + |c\rangle \langle c|) \mathcal{H}_I (|v\rangle \langle v| + |c\rangle \langle c|), \\ \implies \mathcal{H}_I &= -(d_{vc} |v\rangle \langle c| + d_{cv} |c\rangle \langle v|) E(t), \end{aligned} \quad (1.1.7)$$

pues $\langle v| \mathbf{d} |v\rangle = 0 \wedge \langle c| \mathbf{d} |c\rangle = 0$, en ambos casos por paridad, y se definió:

$$d_{cv} := \langle c | \mathbf{d} \cdot \hat{e} | v \rangle, \quad (1.1.8a)$$

$$d_{vc} := \langle v | \mathbf{d} \cdot \hat{e} | c \rangle, \quad (1.1.8b)$$

donde \hat{e} es el versor asociado a $\mathbf{E}(t)$. Las cantidades d_{cv}, d_{vc} son los elementos de matriz no nulos del operador momento dipolar eléctrico, las cuales satisfacen además que $d_{cv} = d_{vc}^*$ (ver Apéndice A.1).

Considerando el estado más general del electrón:

$$|\Psi(t)\rangle = |v\rangle C_v(t) + |c\rangle C_c(t), \quad (1.1.9)$$

se puede ver que su evolución temporal se rige por el \mathcal{H} total a través de la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I) |\Psi(t)\rangle, \quad (1.1.10)$$

con lo cual, notando $C_i(t) \equiv C_i$, $\frac{\partial}{\partial t} C_i = \dot{C}_i$, $i = v, c$, y aprovechando las descomposiciones hechas en las Ecs. (1.1.6), (1.1.7), se tiene:

$$\begin{aligned} i\hbar \left(|v\rangle \dot{C}_v + |c\rangle \dot{C}_c \right) &= [\epsilon_v |v\rangle \langle v| + \epsilon_c |c\rangle \langle c| - (d_{vc} |v\rangle \langle c| + d_{cv} |c\rangle \langle v|) E(t)] (|v\rangle C_v + |c\rangle C_c) = \\ &= \epsilon_v |v\rangle C_v + \epsilon_c |c\rangle C_c - d_{cv} E(t) |c\rangle C_v - d_{vc} E(t) |v\rangle C_c, \end{aligned}$$

lo cual se puede ordenar en el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} i\hbar \dot{C}_v = \epsilon_v C_v - d_{vc} E(t) C_c \\ i\hbar \dot{C}_c = \epsilon_c C_c - d_{cv} E(t) C_v \end{cases} \quad (1.1.11)$$

Para ejemplificar, se considera un campo eléctrico consistente con la aproximación dipolar, i.e. independiente de la posición, dado por:

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t), \quad (1.1.12)$$

el cual permite escribir el sistema de ecuaciones anterior de la siguiente forma:

$$\begin{cases} i\hbar \dot{C}_v = \epsilon_v C_v - d_{vc} E_0 \cos(\omega t) C_c \\ i\hbar \dot{C}_c = \epsilon_c C_c - d_{cv} E_0 \cos(\omega t) C_v \end{cases} \quad (1.1.13)$$

Si se asume $d_{cv} = |d_{cv}| e^{-i\phi}$ y se define la frecuencia de Rabi ω_R como

$$\omega_R := \frac{|d_{cv}| E_0}{2\hbar}, \quad (1.1.14)$$

el sistema pasa a ser:

$$\begin{cases} \dot{C}_v = -i \frac{\epsilon_v}{\hbar} C_v + 2i \omega_R e^{i\phi} \cos(\omega t) C_c \\ \dot{C}_c = -i \frac{\epsilon_c}{\hbar} C_c + 2i \omega_R e^{-i\phi} \cos(\omega t) C_v \end{cases} \quad (1.1.15)$$

Para resolver el sistema dado por la Ec. (1.1.15), se considera el siguiente cambio de variables:

$$c_v = C_v e^{i\omega_v t} \wedge c_c = C_c e^{i\omega_c t}, \quad (1.1.16)$$

en donde se definen $\omega_v := \frac{\epsilon_v}{\hbar}, \omega_c := \frac{\epsilon_c}{\hbar}$. Con esto:

$$\begin{aligned} \blacksquare \quad & \dot{c}_v e^{-i\omega_v t} + (-i \omega_v) c_v e^{-i\omega_v t} = -i \omega_v c_v e^{-i\omega_v t} + i \omega_R e^{i\phi} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) c_c e^{-i\omega_c t} \\ & \implies \dot{c}_v = i \omega_R e^{i\phi} c_c e^{i\omega_{cv} t} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}). \\ \blacksquare \quad & \dot{c}_c e^{-i\omega_c t} + (-i \omega_c) c_c e^{-i\omega_c t} = -i \omega_c c_c e^{-i\omega_c t} + i \omega_R e^{i\phi} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) c_v e^{-i\omega_v t} \\ & \implies \dot{c}_c = i \omega_R e^{i\phi} c_v e^{-i\omega_{cv} t} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}). \end{aligned}$$

Luego, aplicando la aproximación de onda rotante (RWA), i.e. despreciando los términos que oscilan a frecuencias altas ($\omega_{cv} + \omega$), queda:

$$\begin{cases} \dot{c}_v = i \omega_R e^{i\phi} c_c e^{-i(\omega_{cv}-\omega)t} \\ \dot{c}_c = i \omega_R e^{-i\phi} c_v e^{i(\omega_{cv}-\omega)t} \end{cases} \quad (1.1.17)$$

Se define la desintonía entre la frecuencia de transición ω_{cv} y la del campo ω como:

$$\Delta\omega = \omega_{cv} - \omega. \quad (1.1.18)$$

Con esta definición, se plantea el sistema dado por la Ec. (1.1.17) en forma matricial, lo que lleva a una ecuación de autovalores y autovectores cuyo polinomio característico es:

$$\det \left(\begin{bmatrix} -\lambda & i \omega_R e^{-i(\Delta\omega t - \phi)} \\ i \omega_R e^{i(\Delta\omega t - \phi)} & -\lambda \end{bmatrix} \right) = \lambda^2 + \omega_R^2 = 0, \quad (1.1.19)$$

en donde es trivial ver que los autovalores son $\lambda = \pm i \omega_R$ y, entonces, los autovectores generan subespacios:

$$\begin{aligned} \blacksquare \quad & \langle (1; -e^{i(\Delta\omega t - \phi)}) \rangle, \text{ para } \lambda = -i \omega_R; \\ \blacksquare \quad & \langle (1; e^{i(\Delta\omega t - \phi)}) \rangle, \text{ para } \lambda = i \omega_R. \end{aligned}$$

Con esto, la solución de Ec. (1.1.17) más general se escribe:

$$\begin{cases} c_v(t) = \tilde{c}_1 e^{-i\omega_R t} + \tilde{c}_2 e^{i\omega_R t} \\ c_c(t) = \tilde{c}_1 [-e^{i(\Delta\omega t - \phi)}] e^{-i\omega_R t} + \tilde{c}_2 e^{i(\Delta\omega t - \phi)} e^{i\omega_R t} \end{cases} \quad (1.1.20)$$

siendo $\tilde{c}_1, \tilde{c}_2 \in \mathbb{C}$ constantes de integración.

Luego, se puede definir una frecuencia Ω_R como la hipotenusa de un triángulo rectángulo conformado por las frecuencias de Rabi dos veces y la desintonía como catetos, o sea:

$$\Omega_R = \sqrt{(2\omega_R)^2 + \Delta\omega^2}. \quad (1.1.21)$$

Con las definiciones de $\Delta\omega$ y Ω_R , la solución general se puede reescribir como:

$$\begin{cases} c_v(t) = (v_1 e^{i\Omega_R t/2} + v_2 e^{-i\Omega_R t/2}) e^{-i\Delta\omega t/2} \\ c_c(t) = (c_1 e^{i\Omega_R t/2} + c_2 e^{-i\Omega_R t/2}) e^{i\Delta\omega t/2} \end{cases} \quad (1.1.22)$$

A partir de aquí se puede entender que el sistema presenta las denominadas oscilaciones de Rabi, i.e. una evolución temporal oscilante entre estados $|v\rangle, |c\rangle$ a través de la frecuencia de Rabi y de la desintonía. Las constantes v_1, v_2, c_1, c_2 se determinan a través de las condiciones iniciales $c_v(0), \dot{c}_v(0), c_c(0), \dot{c}_c(0)$, asumiendo $t_0 = 0$, en donde se obtienen:

$$v_1 = \frac{1}{2\Omega_R} [(\Omega_R + \Delta\omega)c_v(0) + (2\omega_R)e^{i\phi}c_c(0)], \quad (1.1.23a)$$

$$v_2 = \frac{1}{2\Omega_R} [(\Omega_R - \Delta\omega)c_v(0) - (2\omega_R)e^{i\phi}c_c(0)], \quad (1.1.23b)$$

$$c_1 = \frac{1}{2\Omega_R} [(\Omega_R - \Delta\omega)c_c(0) + (2\omega_R)e^{-i\phi}c_v(0)], \quad (1.1.23c)$$

$$c_2 = \frac{1}{2\Omega_R} [(\Omega_R + \Delta\omega)c_c(0) - (2\omega_R)e^{-i\phi}c_v(0)]. \quad (1.1.23d)$$

Con éstas, las soluciones se pueden reescribir como:

$$c_v(t) = \left\{ c_v(0) \left[\cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) + i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \right] + i \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{i\phi} c_c(0) \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \right\} e^{-i\Delta\omega t/2}, \quad (1.1.24a)$$

$$c_c(t) = \left\{ c_c(0) \left[\cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \right] + i \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{-i\phi} c_v(0) \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \right\} e^{i\Delta\omega t/2} \quad (1.1.24b)$$

Notar que las soluciones de la Ec. (1.1.24) preservan la norma de $|\Psi(t)\rangle$, o sea:

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = |C_c(t)|^2 + |C_v(t)|^2 = 1 = |c_c(t)|^2 + |c_v(t)|^2, \quad (1.1.25)$$

con lo cual se puede definir una cantidad interpretable como la inversión de población entre estados $|v\rangle, |c\rangle$:

$$W(t) := |c_c(t)|^2 - |c_v(t)|^2, \quad (1.1.26)$$

la cual verifica $-1 \leq W(t) \leq 1$ y vía Ec. (1.1.24), si se consideran condiciones iniciales $c_v(0) = 1 \wedge c_c(0) = 0$, resulta ser (ver Apéndice A.2, culminando en Ec. (A.2.4)):

$$W(t) = - \left[\frac{\Delta\omega^2 - (2\omega_R)^2}{\Omega_R^2} \sin^2 \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) + \cos^2 \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) \right]. \quad (1.1.27)$$

Nótese que en caso $\Delta\omega = 0$ (sin desintonía), luego $W(t) = -\cos(2\omega_R t)$. Por otro lado, bajo la acción de un campo eléctrico incidente, entre los estados $|v\rangle, |c\rangle$ se induce un momento dipolar dado por el valor de expectación del operador dipolo eléctrico, el cual en la dirección \hat{e} del campo es:

$$p(t) = \langle \Psi(t) | \mathbf{d} \cdot \hat{e} | \Psi(t) \rangle, \quad (1.1.28)$$

luego:

$$p(t) = e [C_v^*(t) \langle v | + C_c^*(t) \langle c |] \mathbf{r} \cdot \hat{e} [|v\rangle C_v(t) + |c\rangle C_c(t)] =$$

$$C_v^*(t) d_{vc} C_c(t) + C_c^*(t) d_{cv} C_v(t) = c_c(t) c_v^*(t) d_{vc} e^{-i\omega_{cv} t} + c.c.,$$

quedando para el caso $c_v(0) = 1 \wedge c_c(0) = 0$ (ver Apéndice A.3):

$$p(t) = 2|d_{cv}| \operatorname{Re} \left\{ i \frac{2\omega_R}{\Omega_R} \left[\cos \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \sin \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) \right] \sin \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) e^{-i\omega t} \right\}. \quad (1.1.29)$$

En la Fig. 1 pueden verse las oscilaciones de Rabi para un sistema de dos niveles $|v\rangle, |c\rangle$, asumiendo $c_v(0) = 1 \wedge c_c(0) = 0$, en los casos sin desintonía (Fig. 1a) y con desintonía no nula (Figs. 1b, 1c, 1d). Asimismo, en la Fig. 2 se aprecia la evolución temporal del momento dipolar inducido p , también en los casos desintonía nula (Fig. 2a) y desintonía no nula (Figs. 2b, 2c, 2d). Para estudiar el momento dipolar se supuso $|d_{cv}| = 1,577$ D, resultado proveniente de la integral de una función de onda tipo "s" con una "p" del átomo de hidrógeno ($d_{cv} = e \langle c | \mathbf{r} \cdot \hat{e} | v \rangle = (16\pi/81) e r_0$, r_0 radio de Bohr).

Cuando se tiene desintonía nula, las transiciones entre niveles $|v\rangle, |c\rangle$ son completas pues los coeficientes de la Ec. (1.1.24) se reducen a funciones trigonométricas (multiplicadas por una fase), con frecuencia de oscilación ω_R (Fig. 1a). En cambio, cuando se introduce una desintonía $\Delta\omega = 2\omega_R$, las transiciones decaen a la mitad de su amplitud, manifestándose esto por la inversión de población: $-1 \leq W(t) \leq 0$ (Fig. 1b). Llegándose a duplicar esta última desintonía, i.e. $\Delta\omega = 2 \times (2\omega_R)$, la probabilidad de transición es tal que $|c_c|^2 < 0,25$ (si $c_v(0) = 1$, como se está suponiendo); esto se manifiesta en la Fig. 1c. A partir de cuando la desintonía alcanza ya un orden de magnitud mayor a $2\omega_R$, i.e. $\Delta\omega = 10 \times (2\omega_R)$, las oscilaciones de los coeficientes se vuelven poco apreciables, por lo

que la inversión de población: $W(t) \approx -1$ (Fig. 1d).

Respecto al momento dipolar inducido p , dada la definición según Ec. (1.1.28), tiene que ser nulo cuando se tienen estados puros $|\psi\rangle = |v\rangle, |c\rangle$, a un dado instante, y no nulo cuando $|\psi\rangle$ sea una combinación lineal de estados. Esto se manifiesta en las Figs. 2. En el caso de la Fig. 2a, como la desintonía es nula, habrá transiciones completas, y entonces $p = 0$ cuando $|c_v|^2 = 1 \vee |c_c|^2 = 1$; en cambio, en las Figs. 2b, 2c, 2d puede verse que como las transiciones nunca son completas, $p = 0$ sólo cuando se repite la condición inicial en un período de oscilación de los coeficientes (en este caso $c_v(0) = 1 \wedge c_c(0) = 0$).

Otro aspecto importante a tener en cuenta respecto a p , como puede apreciarse en la Ec. (1.1.29) y en los ejemplos de la Fig. 2, es que está compuesto por una frecuencia rápida que actúa de portadora, que es la ω del campo, y por una frecuencia relativamente lenta que actúa como moduladora, siempre asociada a Ω_R . Existen dos casos límite en donde las expresiones de p dejan ver con sencillez la forma de la moduladora y de la portadora: casos desintonía nula y desintonía alta. Para ello, partiendo de Ec. (1.1.29), se plantea:

$$\begin{aligned}
p(t) &= 2|d_{cv}| \operatorname{Re} \left\{ i \frac{2\omega_R}{\Omega_R} \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) [\cos(\omega t) - i \sin(\omega t)] + \right. \\
&\quad \left. \frac{2\omega_R \Delta\omega}{\Omega_R^2} \sin^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) [\cos(\omega t) - i \sin(\omega t)] \right\} \\
&= 2|d_{cv}| \left[\frac{2\omega_R}{\Omega_R} \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \sin(\omega t) + \frac{2\omega_R \Delta\omega}{\Omega_R^2} \sin^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \cos(\omega t) \right] \\
&= 2|d_{cv}| \frac{2\omega_R}{\Omega_R} \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \sin(\omega t) + \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \cos(\omega t) \right]
\end{aligned} \tag{1.1.30}$$

- Caso I: $\Delta\omega = 0 \implies \Omega_R = 2\omega_R$.

$$\implies p(t) = |d_{cv}| \sin(2\omega_R t) \sin(\omega t). \tag{1.1.31}$$

Llamando $p_{mod}^{(I)}(t) := |d_{cv}| \sin(2\omega_R t)$ a la moduladora de esta última, queda:

$$p(t) = p_{mod}^{(I)}(t) \sin(\omega t). \tag{1.1.32}$$

- Caso II: $\Delta\omega \gg 2\omega_R \implies \Omega_R \approx \Delta\omega$.

$$\begin{aligned}
\implies p(t) &\approx 2|d_{cv}| \frac{2\omega_R}{\Delta\omega} \sin\left(\frac{\Delta\omega t}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{\Delta\omega t}{2}\right) \sin(\omega t) + \sin\left(\frac{\Delta\omega t}{2}\right) \cos(\omega t) \right] \\
&= 2|d_{cv}| \frac{2\omega_R}{\Delta\omega} \sin\left(\frac{\Delta\omega t}{2}\right) \sin\left[\left(\frac{\Delta\omega}{2} + \omega\right) t\right] \\
&\approx 2|d_{cv}| \frac{2\omega_R}{\Delta\omega} \sin\left(\frac{\Delta\omega t}{2}\right) \sin(\omega t).
\end{aligned} \tag{1.1.33}$$

Llamando $p_{mod}^{(II)}(t) := 2|d_{cv}|\frac{2\omega_R}{\Delta\omega} \sin\left(\frac{\Delta\omega}{2}t\right)$ a la moduladora de esta última, queda:

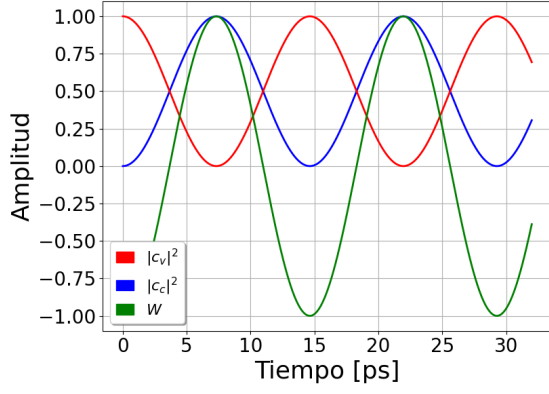
$$p(t) = p_{mod}^{(II)}(t) \sin(\omega t). \quad (1.1.34)$$

En la Fig. 3 se grafican, según Ecs. (1.1.32), (1.1.34), los casos I y II, respectivamente en Figs. 3a, 3b, bajo las mismas condiciones que se venía planteando en los ejemplos de Figs. 1 y 2. Para el caso I se tomó $\Delta\omega = 0$, viendo que $p_{mod}^{(I)}$ es exactamente la moduladora de $p(t)$, mientras que para el caso II bastó con considerar $\Delta\omega = 10 \times 2\omega_R$ para que $p_{mod}^{(II)}$ sea una buena aproximación a la moduladora $p(t)$.

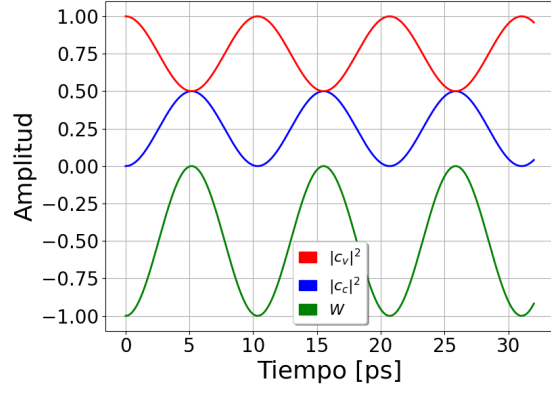
Existen múltiples estudios en donde las oscilaciones de Rabi fueron observadas experimentalmente. Uno de ellos muy reciente es *Combined time and frequency spectroscopy with engineered dual comb spectrometer*, de Sutapa Ghosh y Gadi Eisenstein [3], en donde se excitó una muestra de *Rb* (combinada de ^{85}Rb y ^{87}Rb) para generar distintas transiciones mediante un tren de pulsos láser, de tal manera que el período entre pulsos sea mucho menor que el tiempo de relajación de cada nivel excitado hacia el fundamental y ello permitiera la acumulación electrónica en los respectivos excitados.

En óptica cuántica, la primera evidencia experimental de las oscilaciones de Rabi fue de naturaleza indirecta; se dio en 1969 con el estudio *Self-Induced Transparency*, de Samuel L. McCall y Erwin L. Hahn [4], en donde se observó que excitando un sistema de dos niveles con un 2π -pulso, los átomos quedaban en el estado fundamental al final del pulso. Esto implicó que no habría absorción neta, por lo que un medio que absorbe fuertemente a potencias bajas se volvería transparente frente a un 2π -pulso. Por su parte, las primeras evidencias directas de las oscilaciones de Rabi se dieron en 1972 [5] y 1973 [6] por parte de Hyatt M. Gibbs, en donde se informó sobre la fluorescencia emitida por átomos de *Rb* excitados resonantemente por pulsos cortos de un láser de mercurio; con una baja densidad de átomos para evitar el desfase por colisiones, se detectaron las oscilaciones midiendo la fluorescencia del nivel excitado en función del área del pulso.

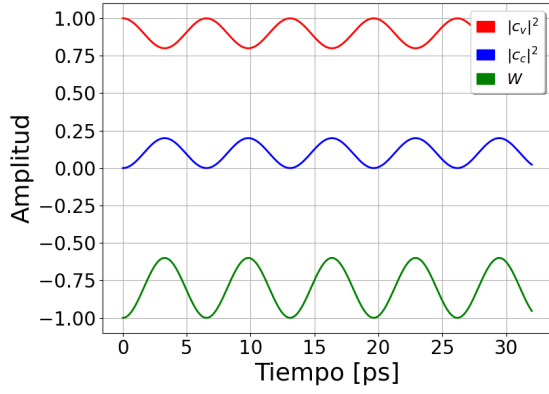
Un resumen más abarcativo sobre las primeras evidencias experimentales de las oscilaciones de Rabi se encuentra en el libro *Quantum Optics, an Introduction*, de Mark Fox [7].



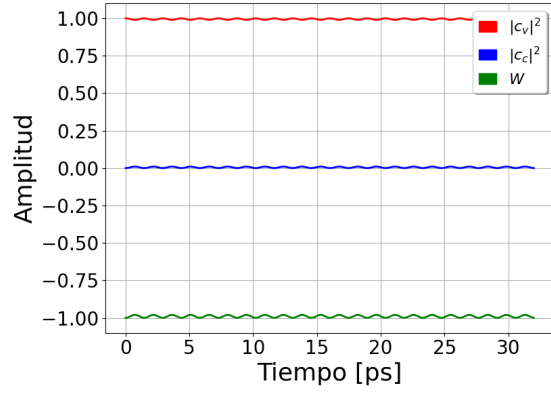
(a) Caso $\Delta\omega = 0$.



(b) Caso $\Delta\omega = 2\omega_R$.



(c) Caso $\Delta\omega = 2 \times (2\omega_R)$.



(d) Caso $\Delta\omega = 10 \times (2\omega_R)$.

Figura 1: Oscilaciones de Rabi en sistema de dos niveles $|v\rangle, |c\rangle$ (caso $c_v(0) = 1 \wedge c_c(0) = 0$) representadas por la evolución temporal del módulo al cuadrado de los coeficientes c_v, c_c del estado general $|\Psi(t)\rangle = |v\rangle c_v(t) + |c\rangle c_c(t)$, considerando además la inversión de población W . Los niveles distan energéticamente $\epsilon_v - \epsilon_c = 1$ eV entre sí, luego $\omega_{cv} = 1,520 \times 10^{15}$ Hz. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu, con lo cual la frecuencia de Rabi es $\omega_R = 2,147 \times 10^{11}$ Hz.

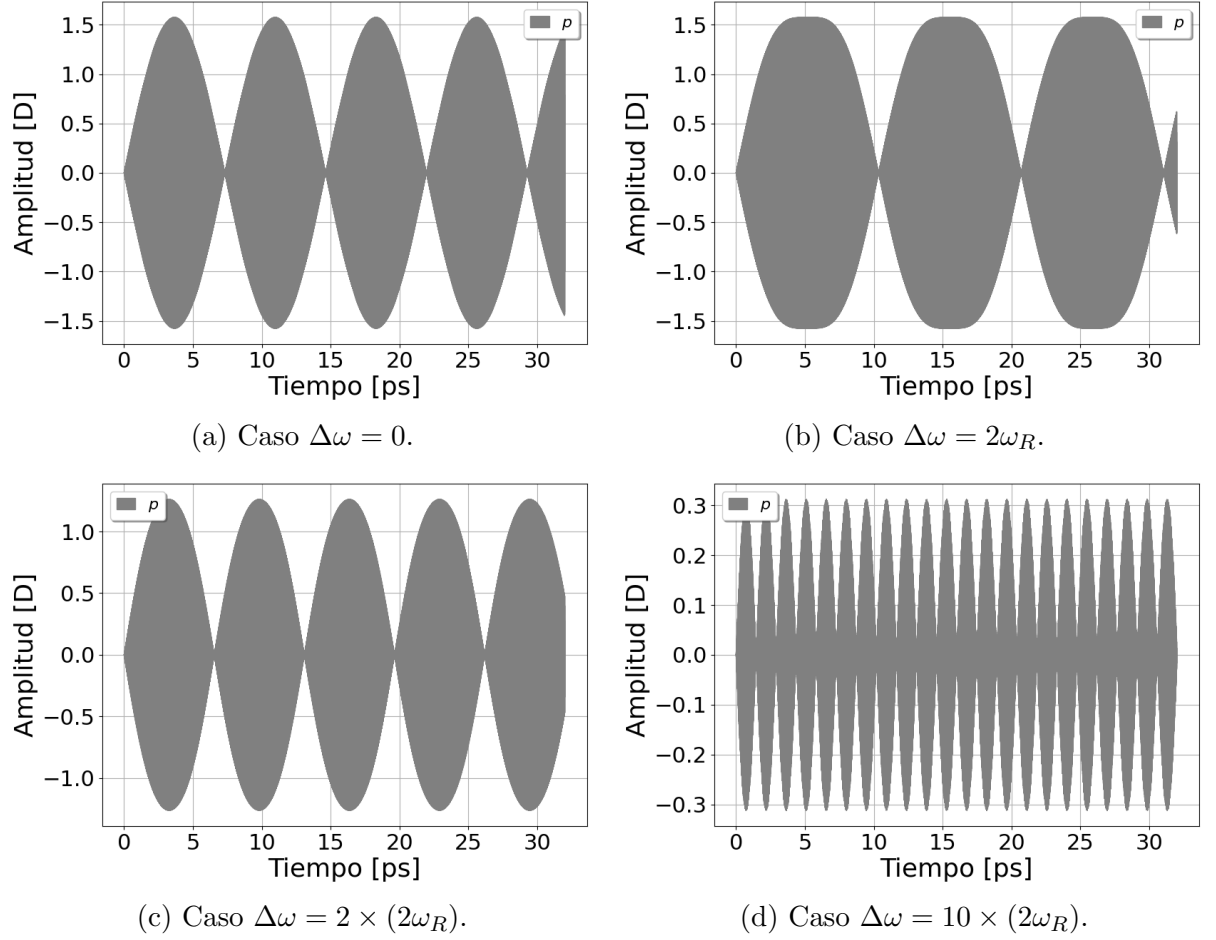


Figura 2: Momento dipolar inducido por las oscilaciones de Rabi en sistema de dos niveles $|v\rangle, |c\rangle$ (caso $c_v(0) = 1 \wedge c_c(0) = 0$), cuya diferencia de energías es $\epsilon_v - \epsilon_c = 1$ eV, luego $\omega_{cv} = 1,520 \times 10^{15}$ Hz. Campo eléctrico de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu, con lo cual $\omega_R = 2,147 \times 10^{11}$ Hz. Para el caso se tomó $|d_{cv}| = 1,577$ D.

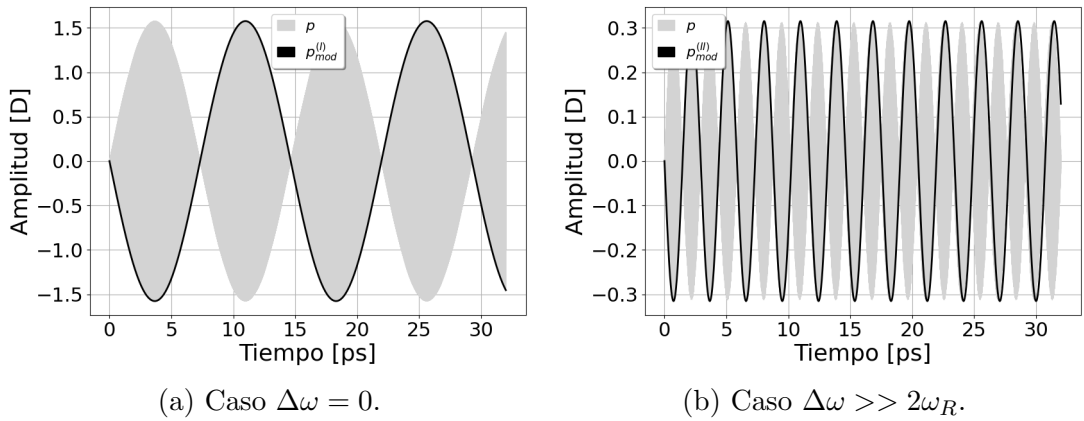


Figura 3: Comparación entre momento dipolar inducido por las oscilaciones de Rabi en sistema de dos niveles $|v\rangle, |c\rangle$ (caso $c_v(0) = 1 \wedge c_c(0) = 0$) y la modulación de su amplitud en casos desintonía nula ($\Delta\omega = 0$) y desintonía alta ($\Delta\omega = 10 \times 2\omega_R$). La diferencia de energías es $\epsilon_v - \epsilon_c = 1$ eV, luego $\omega_{cv} = 1,520 \times 10^{15}$ Hz. Campo eléctrico de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu, con lo cual $\omega_R = 2,147 \times 10^{11}$ Hz. Para el caso se tomó $|d_{cv}| = 1,577$ D.

1.2. Transiciones ópticas dipolares en semiconductores

En un semiconductor, el *gap* entre la banda de valencia y la de conducción corresponde a alguna energía E_g alcanzable mediante un campo eléctrico de frecuencia ω , desde el infrarrojo lejano hasta niveles ópticos, de modo que $E_g = \hbar\omega$.

Cuando un electrón abandona la banda de valencia y pasa a formar parte de la de conducción, el sistema puede modelarse como si el lugar vacante fuera ocupado por un "hueco", éste de masa igual que la del electrón m_0 pero carga $|e|$. Dicho sistema puede ser simplificado como uno de dos niveles, en donde además de la interacción de las partículas con el campo esté la interacción coulombiana entre partículas (electrón-electrón y electrón-hueco). Un primer paso en el estudio de transiciones ópticas se puede hacer ignorando la interacción coulombiana entre electrones de conducción (y con los huecos en valencia).

1.2.1. Hamiltoniano de interacción dipolar luz-semiconductor

Sea un sólido cristalino, en donde cada electrón posee el siguiente hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}), \quad (1.2.1)$$

siendo $V_0(\mathbf{r})$ el potencial de interacción entre el electrón y los núcleos y electrones pertenecientes a iones. Como el sólido forma una red cristalina, el potencial será periódico según los parámetros de red:

$$V_0(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = V_0(\mathbf{r}), \quad (1.2.2)$$

para cualquier desplazamiento $\mathbf{R}_n = \sum_i n_i \mathbf{a}_i$, $n_i \in \mathbb{Z}$, $\{\mathbf{a}_i\}$ conjunto de vectores primitivos de la red.

Las auto-funciones del hamiltoniano \mathcal{H}_0 son las funciones de onda electrónicas que satisfacen el Teorema de Bloch:

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \psi_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r}) = \psi_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r} + \mathbf{R}_n), \quad (1.2.3)$$

siendo λ el número cuántico que determina los niveles de energía (bandas, en este caso, pues las energías dependen también de \mathbf{k}). Luego, si L^3 es el volumen del cristal, las auto-funciones son:

$$\psi_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r}), \quad (1.2.4)$$

en donde las u_λ son las denominadas *funciones de Bloch*, las cuales son tales que $u_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r}) = u_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$, o sea satisfacen la periodicidad de la red.

Como $\psi_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \lambda, \mathbf{k} \rangle$, el \mathcal{H}_0 diagonalizado por la base de estados $\{|\lambda, \mathbf{k}\rangle\}$ es:

$$\mathcal{H}_0 = \hbar \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \omega_{\lambda, \mathbf{k}} |\lambda, \mathbf{k}\rangle \langle \lambda, \mathbf{k}|, \quad (1.2.5)$$

pudiéndose definir a las energías $\epsilon_{\lambda,\mathbf{k}} := \hbar\omega_{\lambda,\mathbf{k}}$.

En semiconductores con gap directo, en un entorno de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, las bandas de valencia y conducción se comportan como dicta el esquema de la Fig. 4: dos parábolas, una convexa (conducción) y otra cóncava (valencia), en donde la distancia mínima entre ellas se da en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ y vale E_g . Esto da lugar a la interpretación de masas efectivas tales que un electrón libre, para un dado \mathbf{k} , podría tener una energía equivalente a la del punto que corresponda en cada parábola E vs. \mathbf{k} , o sea:

$$\epsilon_{v,\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_v}, \quad (1.2.6a)$$

$$\epsilon_{c,\mathbf{k}} = E_g + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_c}, \quad (1.2.6b)$$

asumiendo v, c como los números cuánticos que caracterizan a la banda de valencia y de conducción, respectivamente, de modo que la masa efectiva $m_v < 0$ para poder representar la concavidad de la parábola. Con esto, para un dado \mathbf{k} , si un electrón se encuentra en la banda de valencia, para poder realizarse la transición necesitaría de una excitación externa que entregase un $\Delta E(\mathbf{k})$:

$$\Delta E(\mathbf{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_r}, \quad (1.2.7)$$

con m_r tal que

$$m_r = \frac{m_c m_v}{m_v - m_c}, \quad (1.2.8)$$

pues $\epsilon_{v,\mathbf{k}} + \Delta E(\mathbf{k}) = E_g + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_v} + \frac{m_v - m_c}{m_c m_v} \right) \mathbf{k}^2 = E_g + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{m_c} = \epsilon_{c,\mathbf{k}}$.

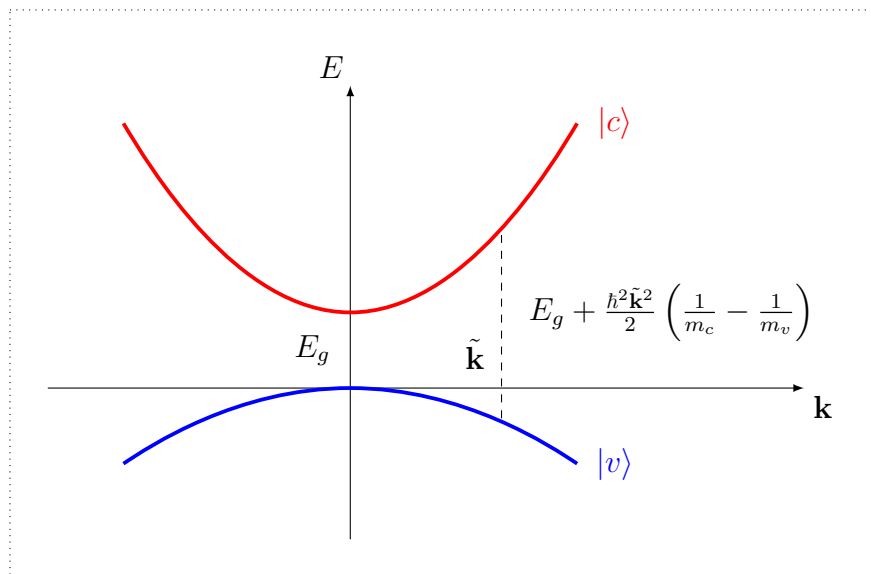


Figura 4: Esquema de bandas de valencia y conducción en torno a $\mathbf{k} = \mathbf{0}$.

Por otro lado, al igual que en la sección anterior, si se agrega un campo eléctrico y se considera la interacción dipolar de la luz con cada electrón, se tiene un \mathcal{H}_I igual al de la Ec. (1.1.5), el cual, descompuesto en la base $\{|\lambda, \mathbf{k}\rangle\}$, resulta:

$$\mathcal{H}_I = - \left(\sum_{\lambda', \lambda, \mathbf{k}', \mathbf{k}} \mathbf{d}_{\lambda' \lambda}(\mathbf{k}'; \mathbf{k}) |\lambda', \mathbf{k}'\rangle \langle \lambda, \mathbf{k}| \right) \cdot \mathbf{E}(t), \quad (1.2.9)$$

con

$$\mathbf{d}_{\lambda' \lambda}(\mathbf{k}'; \mathbf{k}) = \langle \lambda', \mathbf{k}' | \mathbf{d} | \lambda, \mathbf{k} \rangle \quad (1.2.10)$$

elementos de matriz del dipolo eléctrico.

Lo que sigue es relacionar los operadores \mathbf{d} y \mathbf{p} entre sí para poder explicar transiciones interbandas. Para ello se considera el siguiente auxiliar del Apéndice A.4, que culmina en la Ec. (A.4.1). Con esto, es trivial ver que se cumple:

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k}'; \mathbf{k}) &= - \frac{i e \hbar}{m_0 (\epsilon_{c, \mathbf{k}'} - \epsilon_{v, \mathbf{k}})} \langle c, \mathbf{k}' | \mathbf{p} | v, \mathbf{k} \rangle \\ &= - \frac{i e \hbar}{m_0 \Delta E(\mathbf{k})} \langle c, \mathbf{k}' | \mathbf{p} | v, \mathbf{k} \rangle, \end{aligned} \quad (1.2.11)$$

siendo

$$\langle c, \mathbf{k}' | \mathbf{p} | v, \mathbf{k} \rangle = \int_{L^3} d^3x \, \psi_c^*(\mathbf{k}'; \mathbf{r}) \mathbf{p} \psi_v(\mathbf{k}; \mathbf{r}). \quad (1.2.12)$$

Como se está trabajando en un entorno de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ de las bandas de valencia y conducción, las funciones de Bloch $u_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r})$ se pueden aproximar por constantes respecto a \mathbf{k} en dicho entorno, pues varían muy tenuemente para pequeños valores de \mathbf{k} [2], haciendo que las auto-funciones de la Ec. (1.2.4) queden:

$$\psi_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r}) \approx \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_\lambda(\mathbf{0}; \mathbf{r}), \quad (1.2.13)$$

para $\lambda = v, c$, lo cual equivale a que las auto-funciones $\psi_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r})$ adoptaran el \mathbf{k} de la onda plana que pre-multiplica a la función de Bloch centrada en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Luego, insertando la Ec. (1.2.13) en Ec. (1.2.12) y operando como se muestra en el Apéndice A.5 hasta llegar a la Ec. (A.5.1), se tiene:

$$\langle c, \mathbf{k}' | \mathbf{p} | v, \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{L^3} \int_{L^3} d^3x \, e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} u_c^*(\mathbf{0}; \mathbf{r}) (\hbar \mathbf{k} + \mathbf{p}) u_v(\mathbf{0}; \mathbf{r}). \quad (1.2.14)$$

Además, como vale que $u_\lambda(\mathbf{0}; \mathbf{r}) = u_\lambda(\mathbf{0}; \mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$ para cualquier desplazamiento \mathbf{R}_n sobre el cristal, la integral sobre todo el volumen se puede reemplazar por una suma de integrales en cada celda unidad de volumen l^3 , si se hace el cambio de variables $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{R}_n$, con $n \in \{1; 2; \dots; N\}$, siendo N el número de celdas, dándose que $L^3 = Nl^3$:

$$\langle c, \mathbf{k}' | \mathbf{p} | v, \mathbf{k} \rangle = \sum_{n=1}^N \frac{e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{N} \frac{1}{l^3} \int_{l^3} d^3x e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} u_c^*(\mathbf{0}; \mathbf{r}) (\hbar \mathbf{k} + \mathbf{p}) u_v(\mathbf{0}; \mathbf{r}). \quad (1.2.15)$$

Como $\sum_{n=1}^N \frac{e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n}}{N} = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$, resulta:

$$\begin{aligned} \langle c, \mathbf{k}' | \mathbf{p} | v, \mathbf{k} \rangle &= \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \frac{1}{l^3} \int_{l^3} d^3x e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} u_c^*(\mathbf{0}; \mathbf{r}) (\hbar \mathbf{k} + \mathbf{p}) u_v(\mathbf{0}; \mathbf{r}) \\ &= \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \frac{1}{l^3} \int_{l^3} d^3x u_c^*(\mathbf{0}; \mathbf{r}) (\hbar \mathbf{k} + \mathbf{p}) u_v(\mathbf{0}; \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.2.16)$$

Por su parte, en la integral que involucra a $\hbar \mathbf{k}$, el cuasi-momento \mathbf{k} actúa como vector (no como operador) y por tanto puede retirarse a izquierda de la integral, quedando:

$$\frac{1}{l^3} \int_{l^3} d^3x u_c^*(\mathbf{0}; \mathbf{r}) u_v(\mathbf{0}; \mathbf{r}) =: \delta_{vc}, \quad (1.2.17)$$

la cual en este caso se anula pues $v \neq c$, ya que se trata de transiciones interbandas. Con esto, el elemento de matriz $\langle v, \mathbf{k}' | \mathbf{p} | c, \mathbf{k} \rangle$ queda:

$$\langle c, \mathbf{k}' | \mathbf{p} | v, \mathbf{k} \rangle = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \frac{1}{l^3} \int_{l^3} d^3x u_c^*(\mathbf{0}; \mathbf{r}) \mathbf{p} u_v(\mathbf{0}; \mathbf{r}). \quad (1.2.18)$$

Llamando $\mathbf{p}_{cv}(\mathbf{0}) := \frac{1}{l^3} \int_{l^3} d^3x u_c^*(\mathbf{0}; \mathbf{r}) \mathbf{p} u_v(\mathbf{0}; \mathbf{r})$, la Ec. (1.2.11) termina quedando:

$$\mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k}'; \mathbf{k}) = -\frac{i e \hbar}{m_0 \Delta E(\mathbf{k})} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \mathbf{p}_{cv}(\mathbf{0}). \quad (1.2.19)$$

La función $\delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ que aparece en este elemento de matriz del dipolo eléctrico indica que las transiciones que éste es capaz de inducir siempre ocurren sin alterar el estado en el \mathbf{k} -espacio. Se dice por ello que son transiciones ópticas verticales. Asimismo, el elemento de matriz del operador dipolo eléctrico en $\mathbf{k} = \mathbf{k}' = \mathbf{0}$ es:

$$\mathbf{d}_{cv}(\mathbf{0}) = -\frac{i e \hbar}{m_0 \Delta E(\mathbf{0})} \mathbf{p}_{cv}(\mathbf{0}), \quad (1.2.20)$$

adoptando la notación $\mathbf{d}_{cv}(\mathbf{0}) := \mathbf{d}_{cv}(\mathbf{0}; \mathbf{0})$. Con esto, multiplicando y dividiendo Ec. (1.2.19) por $\Delta E(\mathbf{0})$, se tiene:

$$\mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k}'; \mathbf{k}) = \mathbf{d}_{cv}(\mathbf{0}) \frac{\Delta E(\mathbf{0})}{\Delta E(\mathbf{k})} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (1.2.21)$$

De aquí, recordando las Ecs. (1.2.7), (1.2.8) y que en caso de $\mathbf{k} = \mathbf{0} : \Delta E(\mathbf{0}) = E_g$, lo anterior se convierte en:

$$\mathbf{d}_{cv}(\mathbf{k}'; \mathbf{k}) = \mathbf{d}_{cv}(\mathbf{0}) \frac{E_g}{E_g + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_r}} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (1.2.22)$$

Con este último resultado, centrándose únicamente en los niveles v, c , el hamiltoniano de interacción dipolar eléctrica \mathcal{H}_I de la Ec. (1.2.9) se puede escribir como:

$$\mathcal{H}_I = - \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{d}_{cv} |c, \mathbf{k}\rangle \langle v, \mathbf{k}| + \mathbf{d}_{cv}^* |v, \mathbf{k}\rangle \langle c, \mathbf{k}|) \cdot \mathbf{E}(t). \quad (1.2.23)$$

1.2.2. Transiciones ópticas interbanda: dinámica de la matriz densidad

Para estudiar transiciones interbanda v, c , se considera la matriz densidad $\rho(t)$, que se puede expandir en base $\{|\lambda, \mathbf{k}\rangle\}$ para $\lambda = v, c$ y cada \mathbf{k} , como:

$$\rho(t) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda, \lambda'} \rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}; t) |\lambda, \mathbf{k}\rangle \langle \lambda', \mathbf{k}|. \quad (1.2.24)$$

Notar que esta expresión es simplificada, en el sentido de que no incluye coherencias entre los distintos cuasi-momentos \mathbf{k} . Esos elementos no diagonales no son necesarios en esta descripción de electrones no interactuantes entre sí y transiciones ópticas verticales.

La ecuación de movimiento de $\rho(t)$ está dada por la ecuación de Liouville-Von Neumann (ver Apéndice A.6, Ec. (A.6.1)):

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho(t)], \quad (1.2.25)$$

en donde $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I$, siendo $\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_I$ los hamiltonianos restringidos en las dos bandas v, c . Como las transiciones interbanda se dan conservando el mismo \mathbf{k} en cada caso, en lugar de analizar a todo el operador ρ dado por la Ec. (1.2.24), alcanza con estudiar lo que ocurre con cada coeficiente $\rho_{\mathbf{k}}$ definido como:

$$\rho_{\mathbf{k}}(t) := \sum_{\lambda, \lambda'} \rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}; t) |\lambda, \mathbf{k}\rangle \langle \lambda', \mathbf{k}|. \quad (1.2.26)$$

En Ec. (1.2.25), si se desarrolla $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I$ en base $\{|\lambda, \mathbf{k}\rangle\}$, $\lambda = c, v$ (Ecs. (1.2.5), (1.2.23)), resulta que los productos internos resultantes al expresar $\rho_{\mathbf{k}}$ en la misma base anula todos los términos tales que $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$, con lo cual, se tiene para cada \mathbf{k} :

$$\frac{d}{dt} \rho_{\mathbf{k}}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_{\mathbf{k}}, \rho_{\mathbf{k}}(t)], \quad (1.2.27)$$

siendo:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} := \mathcal{H}_{0,\mathbf{k}} + \mathcal{H}_{I,\mathbf{k}}, \quad (1.2.28a)$$

$$\mathcal{H}_{0,\mathbf{k}} := \hbar\omega_{c,\mathbf{k}} |c, \mathbf{k}\rangle \langle v, \mathbf{k}| + \hbar\omega_{v,\mathbf{k}} |v, \mathbf{k}\rangle \langle c, \mathbf{k}|, \quad (1.2.28b)$$

$$\mathcal{H}_{I,\mathbf{k}} := -(\mathbf{d}_{cv} |c, \mathbf{k}\rangle \langle v, \mathbf{k}| + \mathbf{d}_{cv}^* |v, \mathbf{k}\rangle \langle c, \mathbf{k}|) \cdot \mathbf{E}(t). \quad (1.2.28c)$$

Pasando al *picture* de interacción, la Ec. (1.2.27) se simplifica en:

$$\frac{d}{dt} \rho_{\mathbf{k}}^{int}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_{I,\mathbf{k}}^{int}, \rho_{\mathbf{k}}^{int}(t)], \quad (1.2.29)$$

siendo:

$$\rho_{\mathbf{k}}^{int}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t\right) \rho_{\mathbf{k}}(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t\right), \quad (1.2.30)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{I,\mathbf{k}}^{int}(t) &= \exp\left(i\frac{\mathcal{H}_0}{\hbar} t\right) \mathcal{H}_{I,\mathbf{k}} \exp\left(-i\frac{\mathcal{H}_0}{\hbar} t\right) \\ &= -\left[e^{i(\omega_{c,\mathbf{k}} - \omega_{v,\mathbf{k}})t} \mathbf{d}_{cv} |c, \mathbf{k}\rangle \langle v, \mathbf{k}| + e^{-i(\omega_{c,\mathbf{k}} - \omega_{v,\mathbf{k}})t} \mathbf{d}_{cv}^* |v, \mathbf{k}\rangle \langle c, \mathbf{k}| \right] \cdot \mathbf{E}(t). \end{aligned} \quad (1.2.31)$$

Insertando estas dos últimas en Ec. (1.2.29):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{\mathbf{k}}^{int}(t) &= \frac{i}{\hbar} \mathbf{E}(t) \cdot \sum_{\lambda, \lambda'} \rho_{\lambda, \lambda'}^{int}(\mathbf{k}; t) \cdot \\ &= \left[e^{i(\omega_{c,\mathbf{k}} - \omega_{v,\mathbf{k}})t} \mathbf{d}_{cv} (|c, \mathbf{k}\rangle \langle v, \mathbf{k}| \lambda, \mathbf{k}\rangle \langle \lambda', \mathbf{k}| - |\lambda, \mathbf{k}\rangle \langle \lambda', \mathbf{k}| c, \mathbf{k}\rangle \langle v, \mathbf{k}|) + \right. \\ &\quad \left. e^{-i(\omega_{c,\mathbf{k}} - \omega_{v,\mathbf{k}})t} \mathbf{d}_{cv}^* (|v, \mathbf{k}\rangle \langle c, \mathbf{k}| \lambda, \mathbf{k}\rangle \langle \lambda', \mathbf{k}| - |\lambda, \mathbf{k}\rangle \langle \lambda', \mathbf{k}| v, \mathbf{k}\rangle \langle c, \mathbf{k}|) \right], \end{aligned} \quad (1.2.32)$$

siendo:

$$\begin{aligned} \rho_{\lambda, \lambda'}^{int}(\mathbf{k}; t) &= \langle \lambda, \mathbf{k}| \rho^{int}(t) |\lambda', \mathbf{k}\rangle \\ &= \langle \lambda, \mathbf{k}| \exp\left(i\frac{\mathcal{H}_0}{\hbar} t\right) \rho(t) \exp\left(-i\frac{\mathcal{H}_0}{\hbar} t\right) |\lambda', \mathbf{k}\rangle \\ &= e^{i(\omega_{\lambda, \mathbf{k}} - \omega_{\lambda', \mathbf{k}})t} \rho_{\lambda, \lambda'}(\mathbf{k}; t), \end{aligned} \quad (1.2.33)$$

con lo cual es trivial ver que

$$\rho_{vv}^{int}(\mathbf{k}; t) = \rho_{vv}(\mathbf{k}; t), \quad (1.2.34a)$$

$$\rho_{cc}^{int}(\mathbf{k}; t) = \rho_{cc}(\mathbf{k}; t), \quad (1.2.34b)$$

$$\rho_{cv}^{int}(\mathbf{k}; t) = e^{i(\omega_{c,\mathbf{k}} - \omega_{v,\mathbf{k}})t} \rho_{cv}(\mathbf{k}; t), \quad (1.2.34c)$$

$$\rho_{vc}^{int}(\mathbf{k}; t) = e^{-i(\omega_{c,\mathbf{k}} - \omega_{v,\mathbf{k}})t} \rho_{vc}(\mathbf{k}; t). \quad (1.2.34d)$$

De esta forma, operando sobre Ec. (1.2.32) tal como muestra el Apéndice A.7, se llega al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \rho_{vv}(\mathbf{k}; t) = -\frac{i}{\hbar} [\rho_{vc}(\mathbf{k}; t) \mathbf{d}_{cv} - \rho_{cv}(\mathbf{k}; t) \mathbf{d}_{cv}^*] \cdot \mathbf{E}(t) \\ \frac{d}{dt} \rho_{vc}(\mathbf{k}; t) = i(\omega_{c,\mathbf{k}} - \omega_{v,\mathbf{k}}) \rho_{vc}(\mathbf{k}; t) - \frac{i}{\hbar} [\rho_{vv}(\mathbf{k}; t) - \rho_{cc}(\mathbf{k}; t)] \mathbf{d}_{cv}^* \cdot \mathbf{E}(t) \\ \frac{d}{dt} \rho_{cv}(\mathbf{k}; t) = -i(\omega_{c,\mathbf{k}} - \omega_{v,\mathbf{k}}) \rho_{cv}(\mathbf{k}; t) + \frac{i}{\hbar} [\rho_{vv}(\mathbf{k}; t) - \rho_{cc}(\mathbf{k}; t)] \mathbf{d}_{cv} \cdot \mathbf{E}(t) \\ \frac{d}{dt} \rho_{cc}(\mathbf{k}; t) = \frac{i}{\hbar} [\rho_{vc}(\mathbf{k}; t) \mathbf{d}_{cv} - \rho_{cv}(\mathbf{k}; t) \mathbf{d}_{cv}^*] \cdot \mathbf{E}(t) \end{cases} \quad (1.2.35)$$

De la Ec. (1.2.35) es trivial ver que $\frac{d}{dt} \rho_{cc} = -\frac{d}{dt} \rho_{vv}$. Esto era de esperar, pues los elementos de matriz $\rho_{\lambda\lambda}$ dan la probabilidad de encontrar un electrón en el estado $|\lambda, \mathbf{k}\rangle$. Asimismo, se tiene que $\rho_{cv} = \rho_{vc}^*$. Con esto, se tiene que las únicas ecuaciones independientes del sistema son:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \rho_{cv}(\mathbf{k}; t) = -i(\omega_{c,\mathbf{k}} - \omega_{v,\mathbf{k}}) \rho_{cv}(\mathbf{k}; t) + i \frac{\mathbf{d}_{cv} \cdot \mathbf{E}(t)}{\hbar} (\rho_{vv}(\mathbf{k}; t) - \rho_{cc}(\mathbf{k}; t)) \\ \frac{d}{dt} \rho_{cc}(\mathbf{k}; t) = -2 \operatorname{Im} \left[\frac{\mathbf{d}_{cv} \cdot \mathbf{E}(t)}{\hbar} \rho_{cv}^*(\mathbf{k}; t) \right] \end{cases} \quad (1.2.36)$$

en donde se tomó $\rho_{vc}(\mathbf{k}; t) \mathbf{d}_{cv} \cdot \mathbf{E}(t) - \rho_{cv}(\mathbf{k}; t) \mathbf{d}_{cv}^* \cdot \mathbf{E}(t) = 2i \operatorname{Im} [\mathbf{d}_{cv} \cdot \mathbf{E}(t) \rho_{cv}^*(\mathbf{k}; t)]$.

1.2.3. Excitación óptica monocromática a portadores no intectuanes

Asumiendo que el campo eléctrico tiene la forma:

$$\mathbf{E}(t) = \hat{e} \frac{E_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (1.2.37)$$

y aplicando RWA, las Ecs. (1.2.36) quedan:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{cv}(\mathbf{k}; t) = \\ -i \omega_{cv,\mathbf{k}} \rho_{cv}(\mathbf{k}; t) + i \frac{d_{cv} E_0}{2\hbar} [\rho_{vv}(\mathbf{k}; t) e^{-i\omega t} - \rho_{cc}(\mathbf{k}; t) e^{-i\omega t}], \end{aligned} \quad (1.2.38)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{cc}(\mathbf{k};t) = -2 \operatorname{Im} \left[\frac{d_{cv} \cdot E_0}{2\hbar} \rho_{cv}^*(\mathbf{k};t) e^{-i\omega t} \right], \quad (1.2.39)$$

en donde se definió $d_{cv} := \mathbf{d}_{cv} \cdot \hat{e} \wedge \omega_{cv,\mathbf{k}} := \omega_{c,\mathbf{k}} - \omega_{v,\mathbf{k}}$.

Se puede definir la cantidad

$$\omega_R := \frac{d_{cv} E_0}{2\hbar}, \quad (1.2.40)$$

que no es otra cosa que la frecuencia de Rabi, si se asume $d_{cv} \in \mathbb{R}$ ($\implies d_{cv}^* = d_{cv}$). Luego:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_{cv}(\mathbf{k};t) &= \frac{d}{dt} [\rho_{cv}(\mathbf{k};t) e^{i\omega t} e^{-i\omega t}] = \left\{ \frac{d}{dt} [\rho_{cv}(\mathbf{k};t) e^{i\omega t}] - i \omega [\rho_{cv}(\mathbf{k};t) e^{i\omega t}] \right\} e^{-i\omega t} \\ &= -i \omega_{cv,\mathbf{k}} \rho_{cv}(\mathbf{k};t) + i \omega_R [\rho_{vv}(\mathbf{k};t) e^{-i\omega t} - \rho_{cc}(\mathbf{k};t) e^{-i\omega t}] \\ &= \{-i \omega_{cv,\mathbf{k}} [\rho_{cv}(\mathbf{k};t) e^{i\omega t}] + i \omega_R [\rho_{vv}(\mathbf{k};t) - \rho_{cc}(\mathbf{k};t)]\} e^{-i\omega t}. \end{aligned}$$

De esta forma, reagrupando:

$$\frac{d}{dt} [\rho_{cv}(\mathbf{k};t) e^{i\omega t}] = -i \Delta\omega_{\mathbf{k}} [\rho_{cv}(\mathbf{k};t) e^{i\omega t}] + i \omega_R [\rho_{vv}(\mathbf{k};t) - \rho_{cc}(\mathbf{k};t)], \quad (1.2.41)$$

en donde se definió la desintonía o *detuning*:

$$\Delta\omega_{\mathbf{k}} = \omega_{cv,\mathbf{k}} - \omega. \quad (1.2.42)$$

Nótese que se reescribió la Ec. (1.2.38), basada en el elemento de densidad ρ_{cv} , en la Ec. (1.2.41), pasándose a $\rho_{cv} e^{i\omega t}$, lo cual equivale a expresar dicha cantidad en un marco de referencia rotante o *rotating frame*.

Por su parte, la Ec. (1.2.39) también puede ser reescrita en términos de ω_R y del *rotating frame*:

$$\frac{d}{dt}\rho_{cc}(\mathbf{k};t) = -2 \operatorname{Im} \{ \omega_R [\rho_{cv}(\mathbf{k};t) e^{i\omega t}]^* \}. \quad (1.2.43)$$

1.2.4. Transiciones de portadores interactuantes

El sistema de la sección anterior corresponde a un hamiltoniano electrónico general que aglutina los términos de las Ecs. (1.2.5), (1.2.9), quedando:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I. \quad (1.2.44)$$

Descontando el término de interacción dipolar \mathcal{H}_I , el hamiltoniano \mathcal{H}_0 se puede generalizar considerando todas las interacciones coulombianas posibles, i.e. entre electrones de conducción entre sí, más electrones de conducción y iones, más la interacción entre iones. Luego, el término \mathcal{H}_0 se convierte en:

$$\mathcal{H}_0 = T + \mathcal{H}_c^{e-e} + \mathcal{H}_c^{e-i} + \mathcal{H}_c^{i-i}, \quad (1.2.45)$$

en donde T es la energía cinética de los electrones y \mathcal{H}_c^{e-e} , \mathcal{H}_c^{e-i} , \mathcal{H}_c^{i-i} corresponden, respectivamente, a la interacción de electrones entre sí, electrones-iones y iones entre sí. Así escrito, este \mathcal{H}_0 se puede interpretar como el hamiltoniano de un gas de electrones en un sistema de iones fijos en un sólido. Si se relaja la condición de periodicidad de la red, los iones actúan como mero entorno de cargas positivas; esto encaja en la aproximación del *jellium model*, mediante la cual se puede demostrar [8] que los términos \mathcal{H}_c^{e-i} , \mathcal{H}_c^{i-i} contribuyen únicamente como constantes aditivas en \mathcal{H}_0 , lo que permite la redefinición del mismo considerando únicamente la interacción entre electrones dada por \mathcal{H}_c^{e-e} . Pasando a segunda cuantización (ver Apéndice A.8, Ecs. (A.8.11), (A.8.13)), \mathcal{H}_0 se convierte en:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} a_{\mathbf{k},s}^\dagger a_{\mathbf{k},s} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q} \neq 0} \sum_{s,s'} V_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},s'}^\dagger a_{\mathbf{k}',s'} a_{\mathbf{k},s}, \quad (1.2.46)$$

siendo

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{1}{L^3} \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2}, \quad (1.2.47)$$

el potencial coulombiano entre electrones.

Para economizar notación, a menos que sea estrictamente necesario, los índices de spin se pueden dar por contenidos dentro de los cuasi-momentos \mathbf{k} . De este modo, \mathcal{H}_0 se simplifica a:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}, \quad (1.2.48)$$

Antes de reintroducir este hamiltoniano al problema original ($\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I$), se lo debe extender teniendo en cuenta que los operadores de creación y destrucción $a_{\mathbf{k}}^\dagger$, $a_{\mathbf{k}}$, respectivamente, deben crear y destruir partículas en las bandas $\lambda = v, c$, o sea que pasan a ser $a_{\lambda,\mathbf{k}}^\dagger$, $a_{\lambda,\mathbf{k}}$, operadores de creación y destrucción de electrones en banda λ y cuasi-momento \mathbf{k} , lo cual extiende el \mathcal{H}_0 a:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\lambda,\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_\lambda} a_{\lambda,\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda,\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda,\lambda',\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} a_{\lambda,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda',\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda',\mathbf{k}'} a_{\lambda,\mathbf{k}}. \quad (1.2.49)$$

Recordando las Ecs. (1.2.6) y sumando sobre $\lambda, \lambda' = v, c$, la Ec. (1.2.49) pasa a ser:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left(\epsilon_{v,\mathbf{k}} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} + \epsilon_{c,\mathbf{k}} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \left(a_{v,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{v,\mathbf{k}} \right. \\ \left. + a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} + 2 a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} \right), \end{aligned} \quad (1.2.50)$$

en donde se aplicaron las propiedades de anticonmutación de los operadores a^\dagger, a , según las Ecs. (A.8.8).

En cuanto al \mathcal{H}_I dado por la Ec. (1.2.23), se lo puede expresar en segunda cuantización

a través de operadores de campo como:

$$\mathcal{H}_I = \int d^3x \Psi^\dagger(\mathbf{r})(-\mathbf{d}) \cdot \mathbf{E}(t; \mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}), \quad (1.2.51)$$

en donde

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda, \mathbf{k}} a_{\lambda, \mathbf{k}} \psi_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r}), \quad (1.2.52)$$

siendo $\psi_\lambda(\mathbf{k}; \mathbf{r})$ las funciones de Bloch de la Ec. (1.2.13). Observar además que al campo \mathbf{E} se le permitió tener dependencia espacial, lo cual implica (de momento) no considerar la aproximación dipolar. Al mismo se lo puede expresar según:

$$\mathbf{E}(t; \mathbf{r}) = \hat{e} E(t) \frac{1}{2} (e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}) \quad (1.2.53)$$

Teniendo presente que el elemento de matriz del operador \mathbf{d} se escribe según la Ec. (1.2.10) y aprovechando además que $\mathbf{d}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}; \mathbf{k}') \propto \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ (Ec. (1.2.22)), se puede desarrollar:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_I &= \int d^3x \Psi^\dagger(\mathbf{r})(-\mathbf{d}) \cdot \mathbf{E}(t; \mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \\ &= -\frac{1}{2} E(t) \int d^3x \left[\sum_{\lambda, \mathbf{k}} a_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger \psi_\lambda^*(\mathbf{k}; \mathbf{r}) \right] \mathbf{d} \cdot \hat{e} (e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}) \left[\sum_{\lambda', \mathbf{k}'} a_{\lambda', \mathbf{k}'} \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}'; \mathbf{r}) \right] \\ &\xrightarrow{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}} -E(t) \sum_{\lambda, \lambda'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger \left[\int d^3x \psi_\lambda^*(\mathbf{k}; \mathbf{r}) \mathbf{d} \cdot \hat{e} \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}'; \mathbf{r}) \right] a_{\lambda', \mathbf{k}'} \\ &= -E(t) \sum_{\lambda, \lambda'} \sum_{\mathbf{k}} a_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger \mathbf{d}_{\lambda\lambda'} \cdot \hat{e} a_{\lambda', \mathbf{k}}. \end{aligned}$$

Como siempre, llamando $d_{\lambda\lambda'} := \mathbf{d}_{\lambda\lambda'} \cdot \hat{e}$ y recordando que los términos $d_{\lambda\lambda}$ se anulan por paridad, luego, sumando sobre los niveles v, c :

$$\mathcal{H}_I = - \sum_{\mathbf{k}} d_{cv} E(t) \left(a_{c, \mathbf{k}}^\dagger a_{v, \mathbf{k}} + a_{v, \mathbf{k}}^\dagger a_{c, \mathbf{k}} \right), \quad (1.2.54)$$

en donde se tomó que $d_{vc} = d_{cv}^* \wedge d_{cv} \in \mathbb{R}$.

Para estudiar transiciones interbanda v, c , conviene analizar la polarización macroscópica de interbanda, inducida por el campo $\mathbf{E}(t; \mathbf{r})$, mediante la ecuación de Heisenberg a través del hamiltoniano \mathcal{H} cuyas partes constitutivas se obtuvieron en las Ecs. (1.2.50), (1.2.54). Esta polarización macroscópica está conceptualmente emparentada con el momento dipolar inducido, dado por la Ec. (1.1.28), que había sido definido cuando se estudiaron transiciones ópticas en un sistema de dos niveles. En este caso, se define \mathbf{P} , polarización macroscópica de interbanda, como el valor de expectación del operador di-

polo eléctrico sobre el estado inicial (justo al instante de encendido del campo eléctrico):

$$\mathbf{P} = \int d^3x \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \mathbf{d} \Psi(\mathbf{r}) \rangle, \quad (1.2.55)$$

recordando que el índice de spin está contenido en los cuasi-momentos \mathbf{k} que se hallan en los operadores de campo, definidos en Ec. (1.2.52). Luego:

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \sum_{\lambda', \lambda, \mathbf{k}', \mathbf{k}} \langle a_{\lambda', \mathbf{k}'}^\dagger a_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle \int d^3x \psi_{\lambda'}^*(\mathbf{k}'; \mathbf{r}) \mathbf{d} \psi_{\lambda}(\mathbf{k}; \mathbf{r}) \\ &= \sum_{\lambda', \lambda, \mathbf{k}', \mathbf{k}} \langle a_{\lambda', \mathbf{k}'}^\dagger a_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle \mathbf{d}_{\lambda' \lambda}(\mathbf{k}'; \mathbf{k}), \end{aligned} \quad (1.2.56)$$

y específicamente para transiciones interbanda ($\lambda \neq \lambda'$):

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \sum_{\substack{\lambda', \lambda \neq \lambda', \\ \mathbf{k}', \mathbf{k}}} \langle a_{\lambda', \mathbf{k}'}^\dagger a_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle \mathbf{d}_{\lambda' \lambda}(\mathbf{0}) \frac{E_g}{E_g + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_r}} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \\ &= \sum_{\lambda', \lambda \neq \lambda', \mathbf{k}} \langle a_{\lambda', \mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle \mathbf{d}_{\lambda' \lambda}(\mathbf{0}) \frac{E_g}{E_g + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_r}}, \end{aligned} \quad (1.2.57)$$

porque las $\psi_{\lambda}(\mathbf{k}; \mathbf{r})$ son las funciones de Bloch y cumplen todo el desarrollo que va desde Ec. (1.2.11) hasta Ec. (1.2.22).

Si se define la polarización (microscópica) de interbanda $|\lambda\rangle \longrightarrow |\lambda'\rangle$ como:

$$P_{\lambda' \lambda, \mathbf{k}} := \langle a_{\lambda', \mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle. \quad (1.2.58)$$

Luego, se puede interpretar

$$n_{\lambda, \mathbf{k}} := P_{\lambda \lambda, \mathbf{k}} = \langle a_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle \quad (1.2.59)$$

como la densidad de partículas en la banda λ , con cuasi-momento \mathbf{k} . Entonces, para $\lambda = c, v$ y para transiciones $|v, \mathbf{k}\rangle \longrightarrow |c, \mathbf{k}\rangle$, se tiene:

$$n_{v, \mathbf{k}} = \langle a_{v, \mathbf{k}}^\dagger a_{v, \mathbf{k}} \rangle, \quad (1.2.60a)$$

$$P_{cv, \mathbf{k}} = \langle a_{c, \mathbf{k}}^\dagger a_{v, \mathbf{k}} \rangle, \quad (1.2.60b)$$

$$n_{c, \mathbf{k}} = \langle a_{c, \mathbf{k}}^\dagger a_{c, \mathbf{k}} \rangle, \quad (1.2.60c)$$

teniéndose que cumplir, además, el siguiente vínculo trivial:

$$n_{v, \mathbf{k}} + n_{c, \mathbf{k}} = 1, \quad (1.2.61)$$

siempre que no haya procesos intrabanda, como colisiones por Coulomb.

Notar que, tal como ocurría en el caso de portadores no interactuantes con la matriz densidad ρ , en donde no hacía falta estudiar la evolución temporal de todo el operador sino que bastaba con hacerlo para sus elementos de matriz (Ec. 1.2.27), aquí, en lugar de aplicar Heisenberg a todo \mathbf{P} para estudiar transiciones interbanda, alcanza con conocer la evolución temporal de $n_{v,\mathbf{k}}$, $P_{cv,\mathbf{k}}$, $n_{c,\mathbf{k}}$ mediante el conmutador contra los elementos $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ de \mathcal{H} expresados en segunda cuantización:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \mathcal{H}_{0,\mathbf{k}} + \mathcal{H}_{I,\mathbf{k}}. \quad (1.2.62)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{0,\mathbf{k}} = & \epsilon_{v,\mathbf{k}} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} + \epsilon_{c,\mathbf{k}} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \left(a_{v,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{v,\mathbf{k}} \right. \\ & \left. + a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} + 2a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} \right). \end{aligned} \quad (1.2.63)$$

$$\mathcal{H}_{I,\mathbf{k}} = -d_{cv}E(t) \left(a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} + a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} \right). \quad (1.2.64)$$

Por ejemplo, para $P_{cv,\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} \left(a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right) &= \left[\mathcal{H}_{\mathbf{k}}, a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right] \\ &= \left[\mathcal{H}_{0,\mathbf{k}}, a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right] + \left[\mathcal{H}_{I,\mathbf{k}}, a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right] \\ &= \epsilon_{v,\mathbf{k}} \left[a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}, a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right] + \epsilon_{c,\mathbf{k}} \left[a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}}, a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right] + \\ &\quad \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \left\{ \left[a_{v,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{v,\mathbf{k}}, a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right] + \right. \\ &\quad \left[a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}}, a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right] + 2 \left[a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}}, a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right] \Big\} - \\ &\quad d_{cv}E(t) \left\{ \left[a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}, a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right] + \left[a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}}, a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right] \right\} \end{aligned}$$

Operando algebraicamente sobre los operadores de creación y destrucción mediante las relaciones de anti-conmutación y conmutación (Apéndice A.8, Ecs. (A.8.8), (A.8.9)), y luego tomando valor de expectación en los grupos de operadores de creación y destrucción, se llega a:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_{cv,\mathbf{k}} &= \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{c,\mathbf{k}} - \epsilon_{v,\mathbf{k}}) P_{cv,\mathbf{k}} - \frac{i}{\hbar} (n_{v,\mathbf{k}} - n_{c,\mathbf{k}}) d_{cv}E(t) + \\ &\quad \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \left(\left\langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'}^\dagger a_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{c,\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \right\rangle + \left\langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'}^\dagger a_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \right\rangle + \right. \\ &\quad \left. \left\langle a_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}} \right\rangle + \left\langle a_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}} \right\rangle \right) \end{aligned} \quad (1.2.65)$$

Aplicando aproximaciones de fase aleatoria (RPA) y campo medio, los valores de expectación de operadores de cuatro términos se pueden separar en productos de operadores de dos términos, agrupándolos por densidades de partículas y polarizaciones interbanda. Además, los términos que incluyen $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ no aportan a la sumatoria, pues ésta está definida para todo $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$, con lo cual:

$$\begin{aligned} \blacksquare \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'}^\dagger a_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{c,\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \right\rangle &= - \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger \left(\delta_{\mathbf{0},\mathbf{q}} - a_{c,\mathbf{k}'+\mathbf{q}} a_{c,\mathbf{k}'}^\dagger \right) a_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right\rangle = \\ &= - \overbrace{\sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right\rangle \delta_{\mathbf{0},\mathbf{q}}}^{\approx 0} + \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'+\mathbf{q}} a_{c,\mathbf{k}'}^\dagger a_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right\rangle \approx \\ &\sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} n_{c,\mathbf{k}} P_{cv,\mathbf{k}-\mathbf{q}}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \blacksquare \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'}^\dagger a_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \right\rangle &= - \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger \left(\delta_{\mathbf{0},\mathbf{q}} - a_{v,\mathbf{k}'+\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}'}^\dagger \right) a_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right\rangle = \\ &= - \overbrace{\sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right\rangle \delta_{\mathbf{0},\mathbf{q}}}^{\approx 0} + \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'+\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}'}^\dagger a_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right\rangle \approx \\ &\sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} P_{cv,\mathbf{k}} n_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \blacksquare \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}} \right\rangle &= \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \left(\delta_{\mathbf{0},\mathbf{q}} - a_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{c,\mathbf{k}'}^\dagger \right) a_{v,\mathbf{k}} \right\rangle = \\ &= \overbrace{\sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right\rangle \delta_{\mathbf{0},\mathbf{q}}}^{\approx 0} - \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{c,\mathbf{k}'}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right\rangle \approx \\ &= - \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} n_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{cv,\mathbf{k}}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \blacksquare \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}} \right\rangle &= \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \left(\delta_{\mathbf{0},\mathbf{q}} - a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}'}^\dagger \right) a_{v,\mathbf{k}} \right\rangle = \\ &= \overbrace{\sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right\rangle \delta_{\mathbf{0},\mathbf{q}}}^{\approx 0} - \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\langle a_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}'}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \right\rangle \approx \\ &= - \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} P_{cv,\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{v,\mathbf{k}}. \end{aligned}$$

Juntando todo lo anterior:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}P_{cv,\mathbf{k}} &= \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{c,\mathbf{k}} - \epsilon_{v,\mathbf{k}})P_{cv,\mathbf{k}} - \frac{i}{\hbar} (n_{v,\mathbf{k}} - n_{c,\mathbf{k}}) d_{cv}E(t) + \\
&\quad \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} (n_{c,\mathbf{k}} P_{cv,\mathbf{k}-\mathbf{q}} + P_{cv,\mathbf{k}} n_{v,\mathbf{k}-\mathbf{q}} - n_{c,\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{cv,\mathbf{k}} - P_{cv,\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{v,\mathbf{k}}) \\
&= \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{c,\mathbf{k}} - \epsilon_{v,\mathbf{k}})P_{cv,\mathbf{k}} - \frac{i}{\hbar} (n_{v,\mathbf{k}} - n_{c,\mathbf{k}}) d_{cv}E(t) - \\
&\quad \frac{i}{\hbar} (n_{v,\mathbf{k}} - n_{c,\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{cv,\mathbf{q}} - \frac{i}{\hbar} \left(\sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{c,\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{v,\mathbf{q}} \right) P_{cv,\mathbf{k}} \\
\Rightarrow \frac{d}{dt}P_{cv,\mathbf{k}} &= \frac{i}{\hbar} \left[\left(\epsilon_{c,\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{c,\mathbf{q}} \right) - \left(\epsilon_{v,\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{v,\mathbf{q}} \right) \right] P_{cv,\mathbf{k}} - \\
&\quad \frac{i}{\hbar} (n_{v,\mathbf{k}} - n_{c,\mathbf{k}}) \left(d_{cv}E(t) + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{cv,\mathbf{q}} \right). \tag{1.2.66}
\end{aligned}$$

Para $n_{c,\mathbf{k}}$ y $n_{v,\mathbf{k}}$, se sigue el mismo camino que con $P_{cv,\mathbf{k}}$ (Apéndice A.9): se plantea la ecuación de Heisenberg para $a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}}$ y $a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}$, respectivamente, se opera algebraicamente sobre los operadores de creación y destrucción y, posteriormente, se toman valores de expectación, llegando a ecuaciones similares a Ec. (1.2.65), para luego aplicar RPA y campo medio sobre los valores de expectación de cada grupo de cuatro operadores para convertirlos en productos de valores de expectación de dos, interpretables como $P_{cv,\mathbf{k}}$, $n_{c,\mathbf{k}}$, $n_{v,\mathbf{k}}$; se reemplazan éstos, se agrupa todo convenientemente y se llega a las siguientes:

$$\frac{d}{dt}n_{c,\mathbf{k}} = \frac{2}{\hbar} \text{Im} \left[\left(d_{cv}E(t) + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{cv,\mathbf{q}} \right) P_{cv,\mathbf{k}}^* \right], \tag{1.2.67}$$

$$\frac{d}{dt}n_{v,\mathbf{k}} = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \left[\left(d_{cv}E(t) + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{cv,\mathbf{q}} \right) P_{cv,\mathbf{k}}^* \right] = -\frac{d}{dt}n_{c,\mathbf{k}}. \tag{1.2.68}$$

Antes de continuar trabajando con las Ecs. (1.2.66), (1.2.67), (1.2.68), conviene hacer un cambio de notación que proviene de la siguiente reinterpretación: cuando un electrón de cuasi-momento \mathbf{k} es promovido a la banda de conducción, en su lugar, en la banda de valencia, aparece un hueco de masa $m_h = -m_v$, carga $|e|$ y cuasi-momento $(-\mathbf{k})$.

En la notación electrón-hueco, valen las siguientes:

$$\beta_{-\mathbf{k}}^\dagger := a_{v,\mathbf{k}}, \tag{1.2.69a}$$

$$\beta_{-\mathbf{k}} := a_{v,\mathbf{k}}^\dagger, \tag{1.2.69b}$$

pues aniquilar/crear un electrón en valencia es crear/aniquilar un hueco. También se nota:

$$\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger := a_{c,\mathbf{k}}^\dagger, \quad (1.2.70a)$$

$$\alpha_{\mathbf{k}} := a_{c,\mathbf{k}}, \quad (1.2.70b)$$

lo que permite reescribir la polarización y las poblaciones:

$$n_{e,\mathbf{k}} := \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle \quad (1.2.71a)$$

$$n_{h,\mathbf{k}} := \langle \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} \rangle \quad (1.2.71b)$$

$$P_{\mathbf{k}} := P_{eh,\mathbf{k}} = \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \rangle \quad (1.2.71c)$$

Por su parte, las poblaciones tienen que cumplir:

$$n_{h,\mathbf{k}} = 1 - n_{v,\mathbf{k}}, \quad (1.2.72a)$$

$$n_{e,\mathbf{k}} = n_{c,\mathbf{k}}, \quad (1.2.72b)$$

entonces, por el vínculo dado por Ec. (1.2.61), $(1 - n_{h,\mathbf{k}}) + n_{e,\mathbf{k}} = 1$, así que las poblaciones quedan igualadas:

$$n_{e,\mathbf{k}} = n_{h,\mathbf{k}}. \quad (1.2.73)$$

Como los huecos son cuasi-partículas de masa $m_h = -m_v > 0$, también hay que reescribir la energía asociada a la banda de valencia $\epsilon_{v,\mathbf{k}}$:

$$\epsilon_{v,\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_v} = -\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_h} \quad (1.2.74)$$

Con los operadores de creación y destrucción α, β se podría rehacer todo el problema, partiendo de la reescritura del hamiltoniano en términos de estos operadores. No obstante, habiéndose llegado a las Ecs. (1.2.66), (1.2.67), (1.2.68), basta con reempalzar las poblaciones y la energía $\epsilon_{v,\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_{\mathbf{k}} = & \frac{i}{\hbar} \left[\left(\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_c} + E_g \right) - \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{e,\mathbf{q}} \right) + \right. \\ & \left. \left(\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_h} + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right) - \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{h,\mathbf{q}} \right) \right] P_{\mathbf{k}} - \\ & \frac{i}{\hbar} (1 - n_{h,\mathbf{k}} - n_{e,\mathbf{k}}) \left(d_{cv} E(t) + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{\mathbf{q}} \right), \end{aligned} \quad (1.2.75)$$

$$\frac{d}{dt}n_{e,\mathbf{k}} = \frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} \left[\left(d_{cv}E(t) + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{\mathbf{q}} \right) P_{\mathbf{k}}^* \right], \quad (1.2.76)$$

y por el vínculo de la Ec. (1.2.73):

$$\frac{d}{dt}n_{h,\mathbf{k}} = \frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} \left[\left(d_{cv}E(t) + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{\mathbf{q}} \right) P_{\mathbf{k}}^* \right]. \quad (1.2.77)$$

Notar que los términos $\sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{h,\mathbf{q}}$, $\sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{\mathbf{q}}$ son invariantes ante el cambio $\mathbf{k} \longrightarrow (-\mathbf{k})$, con lo cual en Ecs. (1.2.75), (1.2.76), (1.2.77) basta con cambiar la notación $P_{cv} \longrightarrow P$ y $n_v \longrightarrow n_h$.

Se definen las energías de electrón y de hueco:

$$\epsilon_{e,\mathbf{k}} := \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_c} + E_g, \quad (1.2.78a)$$

$$\epsilon_{h,\mathbf{k}} := \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_h} + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}, \quad (1.2.78b)$$

lo que permite entender que, en torno a $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, los electrones de conducción pertenecen a la banda de energía $\epsilon_{e,\mathbf{k}} = \epsilon_{c,\mathbf{k}}$ (tal como antes); no obstante, para los huecos, se puede interpretar que existe una "banda" en dicho entorno cuya energía es $\epsilon_{h,\mathbf{k}}$. Recordando el esquema de la Fig. 4, esto último se esquematiza en la Fig. 5.

Se definen las auto-energías de intercambio:

$$\Sigma_{e,\mathbf{k}} := - \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{e,\mathbf{q}}, \quad (1.2.79a)$$

$$\Sigma_{h,\mathbf{k}} := - \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{h,\mathbf{q}}, \quad (1.2.79b)$$

las cuales puede verse que son las responsables de renormalizar las energías de las bandas en todo $\mathbf{k} \in 1\text{ZB}$, según vaya cambiando la población de electrones y de huecos.

Se define la frecuencia generalizada de Rabi:

$$\omega_{R,\mathbf{k}} := \frac{d_{cv}E(t)}{\hbar} + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{\mathbf{q}}. \quad (1.2.80)$$

Con las definiciones adoptadas en las Ecs. (1.2.78), (1.2.79), (1.2.86), la evolución temporal de las cantidades $P_{\mathbf{k}}$, $n_{e,\mathbf{k}}$, $n_{h,\mathbf{k}}$ se pueden resumir en el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} P_{\mathbf{k}} = \frac{i}{\hbar} [(\epsilon_{e,\mathbf{k}} + \Sigma_{e,\mathbf{k}}) + (\epsilon_{h,\mathbf{k}} + \Sigma_{h,\mathbf{k}})] P_{\mathbf{k}} - i \omega_{R,\mathbf{k}} (1 - n_{h,\mathbf{k}} - n_{e,\mathbf{k}}), \\ \frac{d}{dt} n_{e,\mathbf{k}} = 2 \operatorname{Im} (\omega_{R,\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}}^*), \\ \frac{d}{dt} n_{h,\mathbf{k}} = 2 \operatorname{Im} (\omega_{R,\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}}^*). \end{cases} \quad (1.2.81)$$

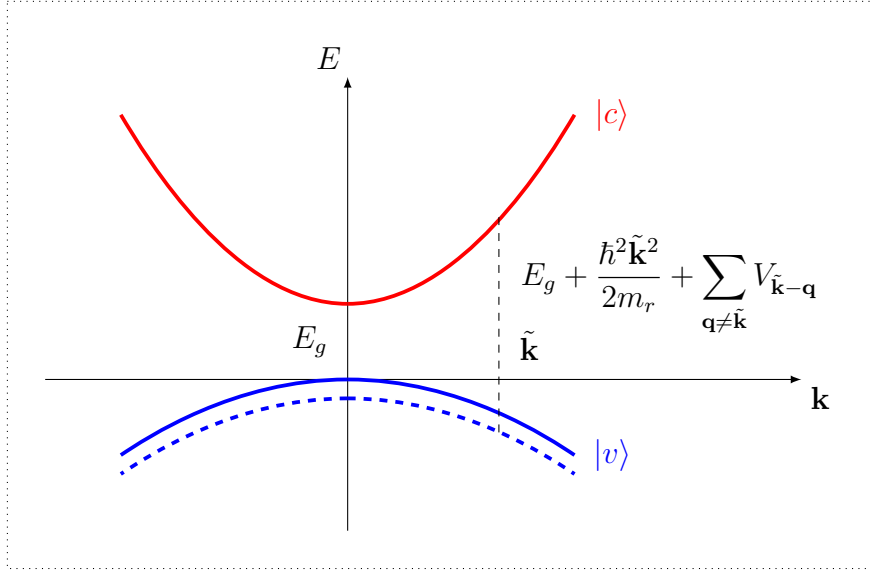


Figura 5: Esquema de bandas de valencia y conducción en torno a $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ cuando se adopta la notación electrón-hueco; se puede suponer que los huecos existen en una "banda" cuya energía en ese entorno es $\epsilon_{h,\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \tilde{\mathbf{k}}^2}{2m_h} + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$.

1.2.5. Excitación óptica monocromática a portadores intectuentes

Adoptando un campo eléctrico cuya función temporal sea

$$E(t) = \frac{E_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (1.2.82)$$

y aplicando RWA sobre las Ecs. (1.2.81), éstas se describen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_{\mathbf{k}} = & \frac{i}{\hbar} [(\epsilon_{e,\mathbf{k}} + \Sigma_{e,\mathbf{k}}) + (\epsilon_{h,\mathbf{k}} + \Sigma_{h,\mathbf{k}})] P_{\mathbf{k}} \\ & - i \left(\frac{d_{cv} E_0}{2\hbar} e^{-i\omega t} + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{\mathbf{q}} \right) (1 - n_{h,\mathbf{k}} - n_{e,\mathbf{k}}), \end{aligned} \quad (1.2.83)$$

$$\frac{d}{dt} n_{e,\mathbf{k}} = 2 \operatorname{Im} \left[\left(\frac{d_{cv} E_0}{2\hbar} e^{-i\omega t} + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{\mathbf{q}} \right) P_{\mathbf{k}}^* \right], \quad (1.2.84)$$

$$\frac{d}{dt} n_{h,\mathbf{k}} = 2 \operatorname{Im} \left[\left(\frac{d_{cv} E_0}{2\hbar} e^{-i\omega t} + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{\mathbf{q}} \right) P_{\mathbf{k}}^* \right], \quad (1.2.85)$$

lo que da lugar a aplicar *rotating frame*:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} P_{\mathbf{k}} &= \frac{d}{dt} [(P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t}) e^{-i\omega t}] = \frac{d}{dt} (P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t}) e^{-i\omega t} - i\omega (P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t}) e^{-i\omega t} \\
&= \frac{i}{\hbar} [(\epsilon_{e,\mathbf{k}} + \Sigma_{e,\mathbf{k}}) + (\epsilon_{h,\mathbf{k}} + \Sigma_{h,\mathbf{k}})] (P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t}) e^{-i\omega t} \\
&\quad - i \left[\frac{d_{cv} E_0}{2\hbar} + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (P_{\mathbf{q}} e^{i\omega t}) \right] (1 - n_{h,\mathbf{k}} - n_{e,\mathbf{k}}) e^{-i\omega t} \\
\Rightarrow \frac{d}{dt} (P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t}) - i\omega (P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t}) &= \frac{i}{\hbar} [(\epsilon_{e,\mathbf{k}} + \Sigma_{e,\mathbf{k}}) + (\epsilon_{h,\mathbf{k}} + \Sigma_{h,\mathbf{k}})] (P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t}) \\
&\quad - i \left[\frac{d_{cv} E_0}{2\hbar} + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (P_{\mathbf{q}} e^{i\omega t}) \right] (1 - n_{h,\mathbf{k}} - n_{e,\mathbf{k}}).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} n_{e,\mathbf{k}} &= \frac{d}{dt} n_{h,\mathbf{k}} = 2 \operatorname{Im} \left[\left(\frac{d_{cv} E_0}{2\hbar} + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} P_{\mathbf{q}} e^{i\omega t} \right) P_{\mathbf{k}}^* e^{-i\omega t} \right] \\
&= 2 \operatorname{Im} \left\{ \left[\frac{d_{cv} E_0}{2\hbar} + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (P_{\mathbf{q}} e^{i\omega t}) \right] (P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t})^* \right\}.
\end{aligned}$$

Bajo esta aproximación, se redefine la frecuencia de Rabi generalizada como:

$$\omega_{R,\mathbf{k}} := \frac{d_{cv} E_0}{2\hbar} + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (P_{\mathbf{q}} e^{i\omega t}). \quad (1.2.86)$$

A su vez, se definen las frecuencias:

$$\omega_{eh,\mathbf{k}} := \frac{(\epsilon_{e,\mathbf{k}} + \Sigma_{e,\mathbf{k}}) + (\epsilon_{h,\mathbf{k}} + \Sigma_{h,\mathbf{k}})}{\hbar}, \quad (1.2.87a)$$

$$\Delta\omega_{\mathbf{k}} := \omega_{eh,\mathbf{k}} - \omega, \quad (1.2.87b)$$

siendo esta última el *detuning* entre la frecuencia $\omega_{eh,\mathbf{k}}$ y la del campo eléctrico. Notar la similitud de la frecuencia de Rabi generalizada y de la desintonía con las definidas en el caso no interactuante (Ec. (1.2.40) y Ec. (1.2.42), respectivamente).

Con estas definiciones, el sistema dado por la Ec. (1.2.81) se convierte en:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{dt} (P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t}) &= i \Delta\omega_{\mathbf{k}} (P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t}) - i \omega_{R,\mathbf{k}} (1 - n_{h,\mathbf{k}} - n_{e,\mathbf{k}}), \\ \frac{d}{dt} n_{e,\mathbf{k}} &= 2 \operatorname{Im} [\omega_{R,\mathbf{k}} (P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t})^*], \\ \frac{d}{dt} n_{h,\mathbf{k}} &= 2 \operatorname{Im} [\omega_{R,\mathbf{k}} (P_{\mathbf{k}} e^{i\omega t})^*]. \end{aligned} \right. \quad (1.2.88)$$

2. Modelo de portadores no interactuantes entre sí

2.1. Solución exacta

Al pasar a notación electrón-hueco, la ecuación de la evolución temporal de $n_{h,\mathbf{k}}$ quedó redundante, sin embargo se la incluyó en todo el análisis por completitud. Si en el sistema de la Ec. (1.2.88) se ignora la ecuación para los huecos y se anulan las interacciones entre partículas, las ecuaciones para $P_{\mathbf{k}}e^{i\omega t}$ y $n_{e,\mathbf{k}}$ pasan a ser idénticas a las Ecs. (1.2.41) y (1.2.43), respectivamente, lo cual era lo esperado, interpretando a las cantidades $P_{\mathbf{k}}$ y $n_{e,\mathbf{k}}$ como los elementos de la matriz densidad $\rho_{cv}(\mathbf{k};t)$ y $\rho_{cc}(\mathbf{k};t)$. En el sistema de la Ec. (1.2.88) puede verse, además, que $P_{\mathbf{k}}e^{i\omega t}, \omega_{R,\mathbf{k}} \in \mathbb{C}$, mientras que $n_{e,\mathbf{k}}, n_{h,\mathbf{k}} \in \mathbb{R}$. Anulando todos los coeficientes $V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ del potencial de interacción (o sea, volviendo al caso no interactuante entre partículas), desde Ec. (1.2.86) se puede ver que, en ese caso, $\omega_{R,\mathbf{k}} \in \mathbb{R}$, pues

$$\omega_{R,\mathbf{k}} := \frac{d_{cv}E_0}{2\hbar}, \quad (2.1.1)$$

lo cual vuelve a ser Ec. (1.2.40), la frecuencia de Rabi en el caso no interactuante. Asimismo, separando $P_{\mathbf{k}}e^{i\omega t}$ en parte real e imaginaria:

$$R_{\mathbf{k}} := \text{Re}(P_{\mathbf{k}}e^{i\omega t}) \wedge I_{\mathbf{k}} := \text{Im}(P_{\mathbf{k}}e^{i\omega t}), \quad (2.1.2)$$

el sistema de la Ec. (1.2.88) pasa a ser:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}R_{\mathbf{k}} = -\Delta\omega_{\mathbf{k}}I_{\mathbf{k}}, \\ \frac{d}{dt}I_{\mathbf{k}} = \Delta\omega_{\mathbf{k}}R_{\mathbf{k}} - \omega_{R,\mathbf{k}}(1 - n_{e,\mathbf{k}} - n_{h,\mathbf{k}}), \\ \frac{d}{dt}n_{e,\mathbf{k}} = -2\omega_{R,\mathbf{k}}I_{\mathbf{k}}, \\ \frac{d}{dt}n_{h,\mathbf{k}} = -2\omega_{R,\mathbf{k}}I_{\mathbf{k}}. \end{cases} \quad (2.1.3)$$

Observar que, como siempre, $\Delta\omega_{\mathbf{k}} = \omega_{eh,\mathbf{k}} - \omega$, pero $\omega_{eh,\mathbf{k}}$ pasa a ser:

$$\omega_{eh,\mathbf{k}} = \frac{\Delta E(\mathbf{k})}{\hbar}, \quad (2.1.4)$$

la $\Delta E(\mathbf{k})$ que se tenía en la Ec. (1.2.7).

El sistema de la Ec. (2.1.3) se puede resolver en forma exacta planteando una ecuación

matricial de autovalores y autovectores (ver Apéndice A.10), obteniéndose:

$$n_{e,\mathbf{k}}(t) = \frac{(2\omega_{R,\mathbf{k}})^2}{\Omega_{R,\mathbf{k}}^2} \sin^2\left(\frac{\Omega_{R,\mathbf{k}}}{2}t\right), \quad (2.1.5a)$$

$$n_{h,\mathbf{k}}(t) = \frac{(2\omega_{R,\mathbf{k}})^2}{\Omega_{R,\mathbf{k}}^2} \sin^2\left(\frac{\Omega_{R,\mathbf{k}}}{2}t\right), \quad (2.1.5b)$$

$$R_{\mathbf{k}}(t) = \frac{1}{2} \frac{2\omega_{R,\mathbf{k}}\Delta\omega_{\mathbf{k}}}{\Omega_{R,\mathbf{k}}^2} [1 - \cos(\Omega_{R,\mathbf{k}}t)] = \frac{2\omega_{R,\mathbf{k}}\Delta\omega_{\mathbf{k}}}{\Omega_{R,\mathbf{k}}^2} \sin^2\left(\frac{\Omega_{R,\mathbf{k}}}{2}t\right), \quad (2.1.5c)$$

$$I_{\mathbf{k}}(t) = -\frac{1}{2} \frac{2\omega_{R,\mathbf{k}}}{\Omega_{R,\mathbf{k}}} \sin(\Omega_{R,\mathbf{k}}t), \quad (2.1.5d)$$

siendo

$$\Omega_{R,\mathbf{k}} = \sqrt{(2\omega_{R,\mathbf{k}})^2 + (\Delta\omega_{\mathbf{k}})^2}, \quad (2.1.6)$$

la misma definición que en Ec. (1.1.21) pero aquí incluyendo la variable discreta \mathbf{k} , lo que manifiesta que estas soluciones se asemejan a las de una partícula en un sistema de dos niveles, sólo que para cada \mathbf{k} por separado.

2.2. Caso unidimensional

A modo de ejemplo, los resultados de las Ecs. (2.1.5) pueden verse en las Figs. 6, 7, en donde se graficaron superficies de nivel de $n_{e,\mathbf{k}}(t)$ y del módulo $|P_{\mathbf{k}}(t)|$ para el caso unidimensional (coincidente con la dirección \hat{e} del campo $\mathbf{E}(t; \mathbf{r})$). La densidad de huecos $n_{h,\mathbf{k}}(t)$ no se graficó pues resulta redundante. Para este ejemplo, utilizando como notación $k \equiv \mathbf{k}$ dado que todas las cantidades serán expresadas en una dimensión, se consideró:

- parámetro lineal de red $a = 5,653 \text{ \AA}$ y $E_g = 1,424 \text{ eV}$ (datos de material GaAs);
- intervalo de tiempo de estudio $[0; \tau]$, $\tau = 32 \text{ ps}$;
- campo eléctrico de amplitud $E_0 = 287 \frac{\text{dyn}}{\text{esu}}$ y frecuencia $\omega = E_g/\hbar = 2,165 \times 10^{15} \text{ Hz}$;

con lo cual $\omega_{R,0} = 1,748 \times 10^{12} \text{ Hz}$. La ω elegida es tal que excita sin *detuning* a los electrones de cuasi-momento $k = 0$, generando en ellos oscilaciones de Rabi completas. Como es de esperar, a medida que k se aleja de 0, aparece un *detuning* $\Delta\omega_k \neq 0$, por lo que esos electrones describen oscilaciones de Rabi incompletas, i.e. oscilaciones que decaen en amplitud y aumentan la frecuencia en tanto crece la distancia al cuasi-momento nulo. Además, en estas figuras, queda en manifiesto que para pequeños apartamientos de $k = 0$ el efecto del *detuning* es tan importante que saliendo del rango de cuasi-momentos tomados en Fig. 6 ya no se aprecian promociones interbanda.

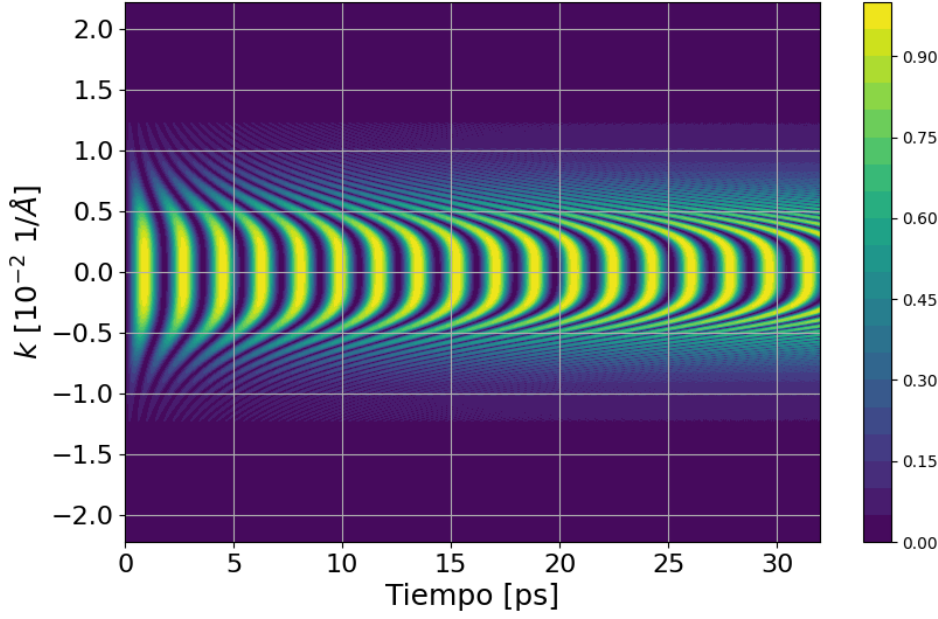


Figura 6: $n_{e,k}(t)$ en modelo de portadores no interactuantes entre sí. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = E_g/\hbar$, siendo $E_g = 1,424$ eV (material *GaAs*), de modo que excite sin *detuning* a los electrones con $k = 0$, generando en ellos oscilaciones de Rabi completas, de periodo $T_0 = 1,797$ ps, siendo $\omega_{R,0} = 1,748 \times 10^{12}$ Hz. En el resto de k se observan oscilaciones de Rabi incompletas y a mayor frecuencia.

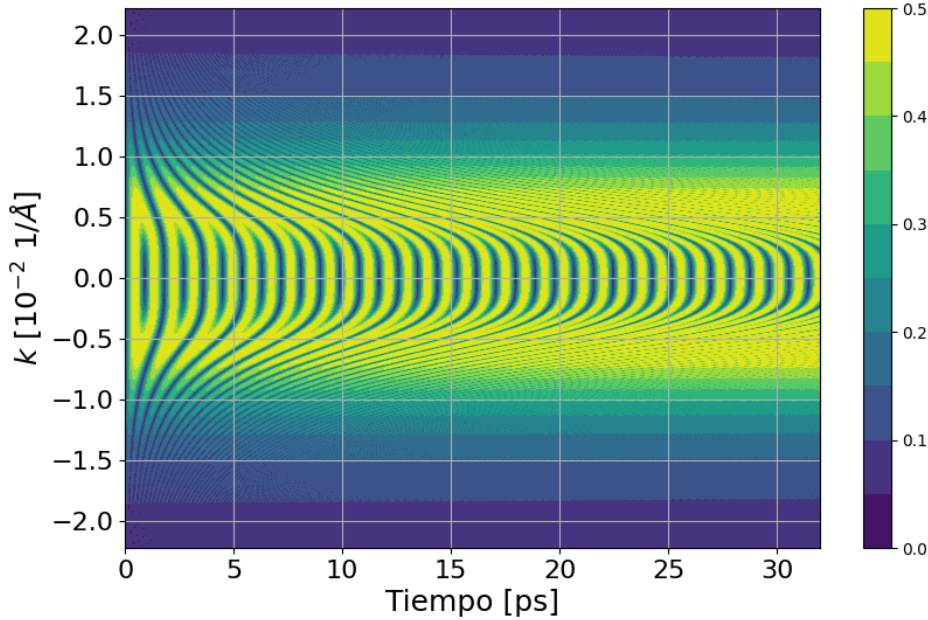


Figura 7: $|P_k(t)|$ en modelo de portadores no interactuantes entre sí. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = E_g/\hbar$, siendo $E_g = 1,424$ eV (material *GaAs*), de modo que excite sin *detuning* a los electrones con $k = 0$, generando en ellos oscilaciones de Rabi completas, de periodo $T_0 = 1,797$ ps, siendo $\omega_{R,0} = 1,748 \times 10^{12}$ Hz. En el resto de k se observan oscilaciones de Rabi incompletas y a mayor frecuencia.

3. Modelo de portadores interactuantes entre sí

3.1. Estimación de self-energies a partir de caso de distribución conocida: Fermi-Dirac en cuasi-1D

Una forma prudente de avanzar en este estudio requiere de estimar las self-energies $\Sigma_{e,\mathbf{k}}, \Sigma_{h,\mathbf{k}}$, dadas por Ec. (1.2.79), para una distribución de población electrónica en conducción (y de huecos en valencia) conocida, es decir, sin pasar por el sistema de la Ec. (1.2.88) que da su evolución temporal. De ese modo, se puede controlar cada self-energy para cada densidad electrónica (y de huecos).

Para simplificar este análisis, se adopta el caso cuasi-unidimensional (en adelante "cuasi-1D"), el cual consiste en considerar al material semiconductor como una cadena lineal de parámetro de red a , tal que existe una dimensión longitudinal de tamaño $L \gg R$, siendo R la máxima distancia transversal. Para fines didácticos, esto equivale a considerar un "cable" de largo $L \gg a$ y de "radio" $R \sim a$. En este caso, el potencial de interacción coulombiana de un electrón se puede tomar como:

$$V(z) = \frac{1}{4\pi\epsilon} e^2 \frac{1}{\sqrt{z^2 + R^2}}, \quad (3.1.1)$$

siendo ϵ la permitividad del medio y z la distancia relativa en la dirección longitudinal. Este potencial se puede reescribir como:

$$V(z) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\epsilon_0}{\epsilon} e^2 \frac{1}{\sqrt{z^2 + R^2}}, \quad (3.1.2)$$

y puede ser llevado a una expresión tipo Ec. (1.2.47), si se calcula su transformada de Fourier (Apéndice A.11):

$$\hat{V}_k = \frac{2}{L} \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} e^2 K_0(R|k|), \quad (3.1.3)$$

siendo ϵ_r la permitividad relativa del medio con respecto al vacío, k cuasi-momento (\mathbf{k} en una dimensión) y K_0 la función modificada de Bessel de segunda especie de orden 0.

Como se está en caso unidimensional y, en general, $n_{e,\mathbf{k}} = n_{h,\mathbf{k}} \implies \Sigma_{e,\mathbf{k}} = \Sigma_{h,\mathbf{k}}$, se puede adoptar, para esta sección, la notación n_k para la densidad de cualquier portador y Σ_k para el módulo de su correspondiente self-energy. Si se asume una distribución de Fermi-Dirac para n_k , lo que corresponde al *ground state* a temperatura $T = 0$ del hamiltoniano del gas de electrones \mathcal{H}_0 dado por Ec. (1.2.46), se tiene:

$$n_k = \begin{cases} 2 & \text{si } |k| \leq k_F \\ 0 & \text{si } |k| > k_F \end{cases}, \quad (3.1.4)$$

separando al spin de la notación de cuasi-momento, de modo que puede haber 2 portadores

por cada k . Además, para el caso unidimensional:

$$k_F = \pi n, \quad (3.1.5)$$

siendo n la densidad total de partículas.

Renombrando $\hat{V}_k \equiv V_{|k|}$, se puede calcular el módulo de la self-energy pasando al continuo:

$$\Sigma_k = \sum_{q \neq k} V_{|k-q|} n_q \longrightarrow \Sigma(k) = \frac{L}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq V(|k-q|) n(q). \quad (3.1.6)$$

Como $n_q \longrightarrow n(q) = 2\Theta(k_F + q)\Theta(k_F - q)$, queda:

$$\Sigma(k) = \frac{L}{\pi} \int_{-k_F}^{k_F} dq V(|k-q|) \quad (3.1.7a)$$

$$= \tilde{C} \int_{-k_F}^{k_F} dq K_0(R|k-q|), \quad (3.1.7b)$$

llamando

$$\tilde{C} := \frac{2}{\pi} \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} e^2. \quad (3.1.8)$$

Tomando el cambio de variables $\tilde{q} = k - q \implies d\tilde{q} = -dq$. Luego:

$$\begin{aligned} \Sigma(k) &= -\tilde{C} \int_{k+k_F}^{k-k_F} d\tilde{q} K_0(R|\tilde{q}|) \\ &= \tilde{C} \int_{k-k_F}^{k+k_F} d\tilde{q} K_0(R|\tilde{q}|), \end{aligned} \quad (3.1.9)$$

3.1.1. Aproximación de la interacción coulombiana por campo medio

La integral de la Ec. (3.1.9) se puede reemplazar por otra cuyo valor sea aproximadamente igual, pero en lugar de utilizar la interacción dada por Ec. (3.1.3) se puede aplicar un modelo mucho más sencillo, haciendo $\int_a^b dx K_0(x) \approx \int_a^{b'} dx y(x)$, con $x = R|\tilde{q}|$. Tomando la función $K_0(x)$ e integrando numéricamente en $\mathbb{R}_{\geq 0}$, puede verse que:

$$\int_0^\infty dx K_0(x) \approx \int_0^4 dx K_0(x) \approx 1,56 \approx 3/2, \quad (3.1.10)$$

observando que $\nexists K_0(0)$, pero sí se puede integrar con límite inferior en 0 pues para la integral un solo punto representa un conjunto de contenido cero.

Por otro lado, la función $K_0 \longrightarrow 0$ rápidamente, por lo que las interacciones a largo alcance -en términos de la variable $R|\tilde{q}|$ - pueden desestimarse ($K_0(x)$ sólo aporta cifras significativas integrando en $[0; 4]$); las de corto-medio alcance ($0 < R|\tilde{q}| \leq 2$) pueden asumirse constantes. En la Fig. (8) puede verse la función modificada de Bessel de segunda

especie $K_0(x)$ junto a una recta constante $y(x) = 3/4$. Ambas funciones verifican:

$$\int_0^\infty dx K_0(x) \approx \int_0^2 dx y(x) = 3/2, \quad (3.1.11)$$

de modo que si se reemplaza $K_0(R|\tilde{q}|)$ por $y_0(R|\tilde{q}|) = \frac{3}{4}\Theta(R|\tilde{q}|)\Theta(2 - R|\tilde{q}|)$ y se integra en un intervalo conveniente, ambas funciones generan la misma self-energy.

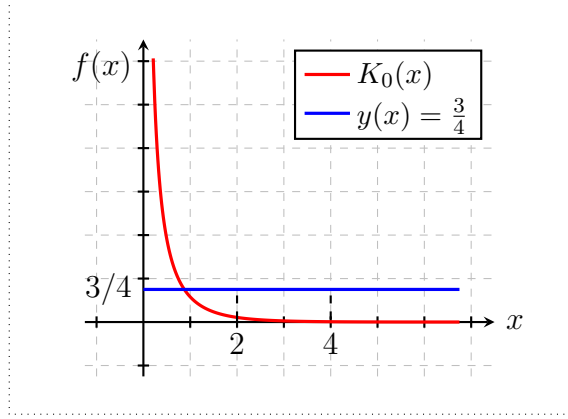


Figura 8: Comparación $K_0(x)$ con la constante $y(x) = 3/4$.

Con lo dicho, la Ec. (3.1.9) pasa a ser:

$$\Sigma(k) \approx \frac{3}{4}\tilde{C} \int_{k-k_F}^{k+k_F} d\tilde{q} \Theta(R|\tilde{q}|)\Theta(2 - R|\tilde{q}|). \quad (3.1.12)$$

Adoptando el cambio de variable $x = R\tilde{q}$ / $|x| = R|\tilde{q}| \implies dx = Rd\tilde{q}$, luego:

$$\Sigma(k) \approx \frac{3}{4}C \int_{R(k-k_F)}^{R(k+k_F)} dx \Theta(|x|)\Theta(2 - |x|), \quad (3.1.13)$$

con $C = \tilde{C}/R$.

Como $\Theta(|x|) = 1_{|x| \geq 0} = 1 \forall x \in \mathbb{R}$, entonces la integral se reduce a:

$$\Sigma(k) \approx \frac{3}{4}C \int_{R(k-k_F)}^{R(k+k_F)} dx \Theta(2 - |x|). \quad (3.1.14)$$

Para estudiar la integral obtenida en Ec. (3.1.14) hay que separar en casos, pues la función escalón de Heaviside que se tiene en el integrando puede cambiar uno o ambos límites de integración. Además, estos casos también dependerán de la comparación entre las cantidades k_F , $2/R$:

1. $R(k + k_F) < -2 \implies k < -\frac{2}{R} - k_F$
 $\implies k \in (-\infty; -(\frac{2}{R} + k_F)) : \Sigma(k) = 0.$
2. $R(k - k_F) < -2 \wedge -2 \leq R(k - k_F) \leq 2 \implies -\frac{2}{R} - k_F \leq k < \mp(\frac{2}{R} - k_F)$
 $\implies k \in [-(\frac{2}{R} + k_F); \mp(\frac{2}{R} - k_F)) : \Sigma(k) = \frac{3}{4}C [R(k + k_F) + 2].$

3. a) $-2 \leq R(k - k_F) < 2 \wedge -2 < R(k + k_F) \leq 2 \implies \frac{2}{R} - k_F \leq k < -(\frac{2}{R} - k_F)$
 $\implies k \in [\frac{2}{R} - k_F; -(\frac{2}{R} - k_F)) : \Sigma(k) = \frac{3}{4}C \ 2Rk_F.$
- b) $-2 \leq R(k - k_F) < 2 \wedge -2 < R(k - k_F) \leq 2$
 $\implies -\frac{2}{R} - k_F < -\frac{2}{R} + k_F \leq k < \frac{2}{R} - k_F < \frac{2}{R} + k_F$
 $\implies k \in [-(\frac{2}{R} - k_F); \frac{2}{R} - k_F) : \Sigma(k) = \frac{3}{4}C [2 - R(k - k_F)].$
4. $-2 \leq R(k - k_F) < 2 \wedge R(k + k_F) \geq 2 \implies \mp(\frac{2}{R} - k_F) \leq k < \frac{2}{R} + k_F$
 $\implies k \in [\mp(\frac{2}{R} - k_F); \frac{2}{R} + k_F) : \Sigma(k) = \frac{3}{4}C [2 - R(k - k_F)].$
5. $R(k - k_F) \geq 2 \implies k \geq \frac{2}{R} + k_F$
 $\implies k \in [\frac{2}{R} + k_F; \infty) : \Sigma(k) = 0.$

Todo el análisis anterior se puede resumir en las Figs. (9), (10), (11), para los casos $k_F < \frac{2}{R}$ ($\iff n < \frac{1}{\pi} \frac{2}{R}$), $k_F = \frac{2}{R}$ ($\iff n = \frac{1}{\pi} \frac{2}{R}$), $k_F > \frac{2}{R}$ ($\iff n > \frac{1}{\pi} \frac{2}{R}$), respectivamente.

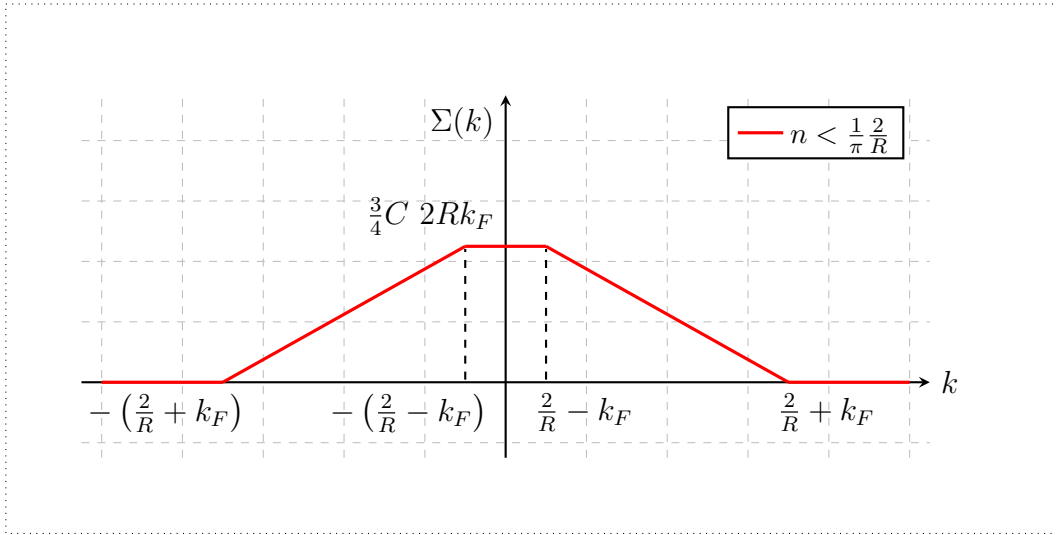


Figura 9: $\Sigma(k)$ en caso $k_F < \frac{2}{R}$.

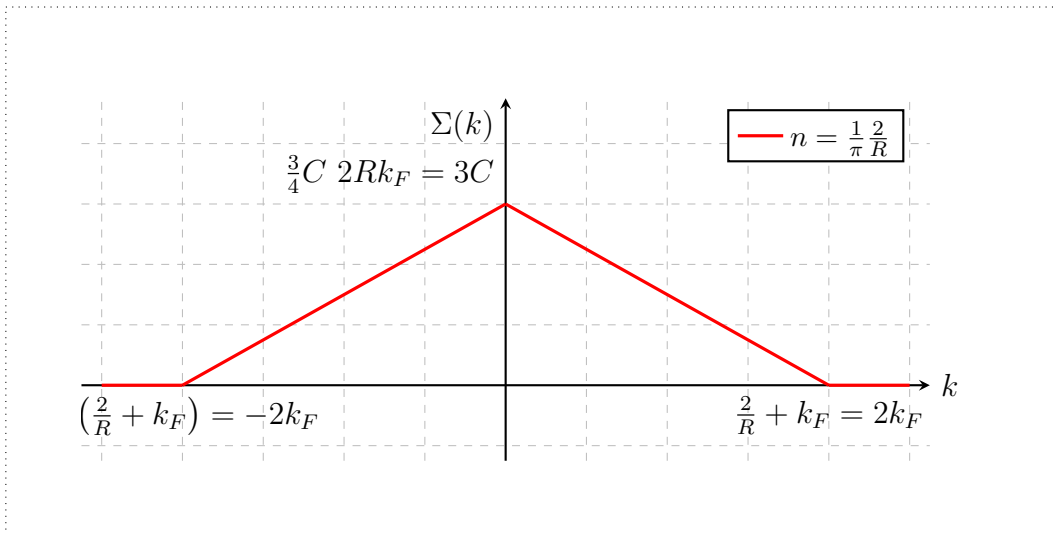


Figura 10: $\Sigma(k)$ en caso $k_F = \frac{2}{R}$.

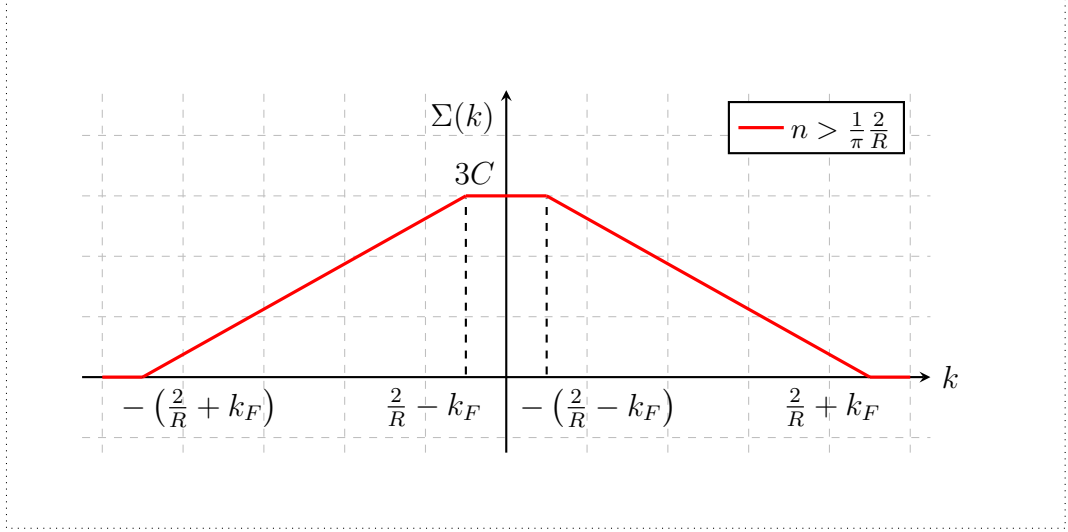


Figura 11: $\Sigma(k)$ en caso $k_F > \frac{2}{R}$.

Como puede observarse, para este modelo de interacción constante a corto-medio alcance, se da que:

$$\Sigma_{max} = \begin{cases} \frac{3}{4}C \ 2R\pi n & \text{si } n < \frac{1}{\pi} \frac{2}{R} \\ 3C & \text{si } n \geq \frac{1}{\pi} \frac{2}{R} \end{cases}, \quad (3.1.15)$$

siendo

$$C = \frac{2}{\pi} \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{e^2}{R}, \quad (3.1.16)$$

con lo cual, en resumen:

$$\Sigma_{max} = \begin{cases} 3 \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} e^2 n & \text{si } n < \frac{1}{\pi} \frac{2}{R} \\ 3 \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} e^2 \frac{1}{\pi} \frac{2}{R} & \text{si } n \geq \frac{1}{\pi} \frac{2}{R} \end{cases}. \quad (3.1.17)$$

Por ejemplo, considerando al material *GaAs*: $\epsilon_r = 12,4 \wedge E_g = 1,424$ eV. Tomando parámetro de red $a = 5,653$ Å, radio $R = 100 a$ y suponiendo una densidad electrónica en conducción $n \geq \frac{1}{\pi} \frac{2}{R}$, la Ec. (3.1.17) arroja el valor $\Sigma_{max} = 3,922 \times 10^{-3}$ eV, lo que implica que, como máximo, una self-energy de una cadena lineal atómica cuasi-1D de estas características de *GaAs* puede representar un 0,27% del gap entre valencia y conducción. En la Fig. 12 se representan las curvas de self-energy en función del cuasi-momento k para los casos $n \ll \frac{1}{\pi} \frac{2}{R}$ (Fig. 12a), $n < \frac{1}{\pi} \frac{2}{R}$ (Fig. 12b), $n = \frac{1}{\pi} \frac{2}{R}$ (Fig. 12c), $n > \frac{1}{\pi} \frac{2}{R}$ (Fig. 12d), en donde se comparan las soluciones obtenidas por integración exacta del potencial aproximado que contiene la función $y_0(R|k - q|)$ -siendo q el cuasi-momento que se integra- junto con su análoga discretizada y la solución discretizada del potencial coulombiano $V_{|k-q|}$, estas últimas integradas numéricamente por regla de Simpson. En ambos casos, las discretizaciones en variable cuasi-momento k se realizaron particionando un entorno de la 1ZB según $\dim(k) = 2Q + 1$, siendo $Q = 10^4$.

En adelante, al trabajar con self-energies es conveniente adoptar la unidad meV. Así, por ejemplo, para *GaAs*: $E_g = 1424$ meV $\wedge \Sigma_{max} = 3,922$ meV ≈ 4 meV.

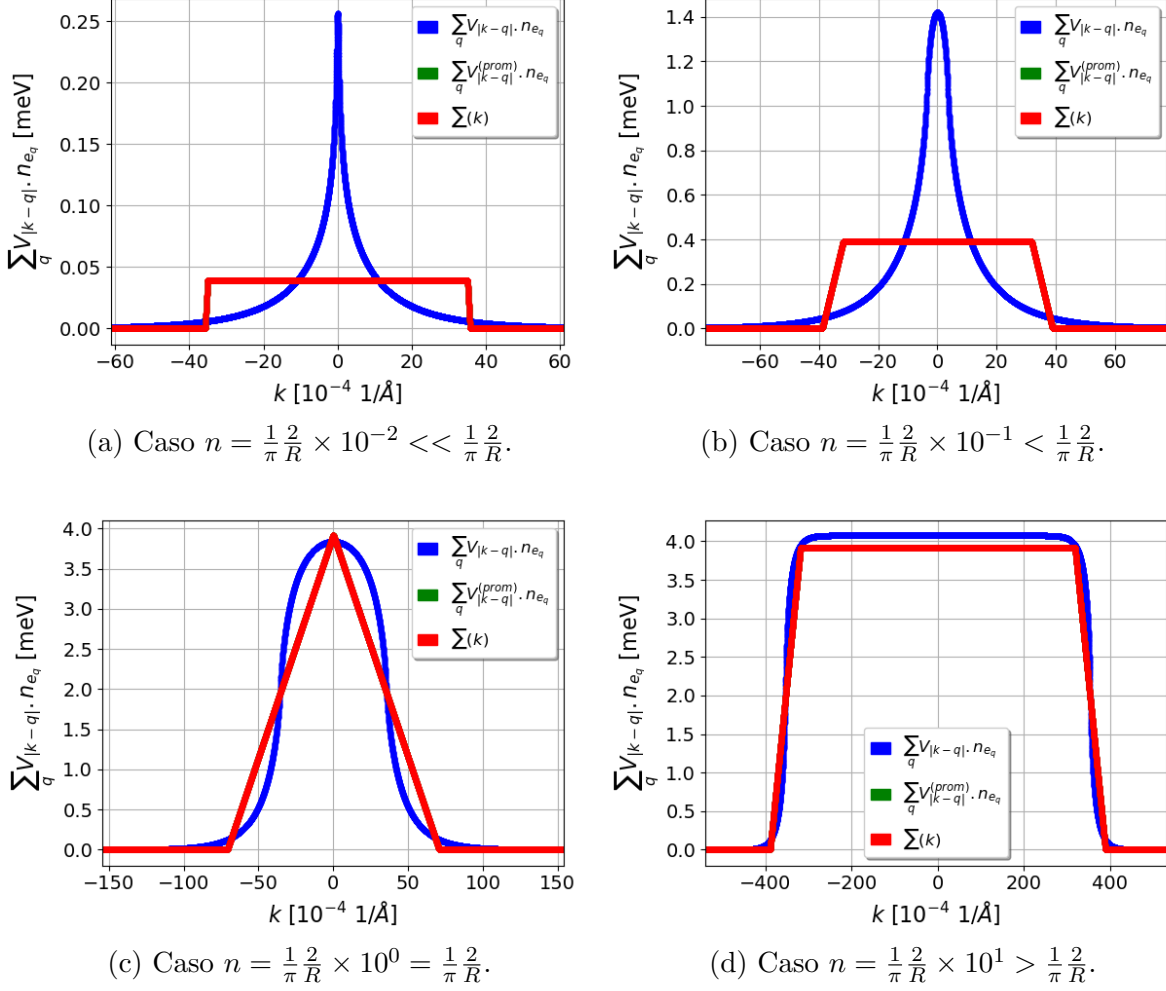


Figura 12: Self-energy para distribución de Fermi-Dirac en cuasi-1D de material $GaAs$: $E_g = 1,424$ eV, $a = 5,653$ Å, $R = 100$ a . En rojo se representan las soluciones $\Sigma(k)$ integrando en forma exacta al potencial aproximado que contiene $y_0(R|k - q|)$, siendo q el cuasi-momento que se integra. En verde las soluciones de este mismo potencial pero discretizado e integrado numéricamente por regla de Simpson (en todos los casos, las curvas verdes quedan totalmente solapadas por las rojas). En azul las self-energies del potencial coulombiano cuasi-1D verdadero $V_{|k-q|}$, integrado numéricamente por regla de Simpson. En ambas discretizaciones en variable cuasi-momento se particionó un entorno de la 1ZB con parámetro $Q = 10^4$, siendo $\dim(k) = 2Q + 1$.

3.1.2. Efecto de la self-energy en la aparición de detuning: comparación con sistema de dos niveles

Para tomar dimensión del efecto que generan las self-energies en los casos de ejemplo descriptos en la Fig. 12, se puede comparar lo que ocurre en cuasi-momento $k = 0$ con el sistema de dos niveles estudiado en la Sección 1.1, que ejemplificaba cuatro casos de detuning en la Fig. 1 ($\epsilon_c - \epsilon_v = 1000$ meV, $\omega_{cv} = 1,520 \times 10^{15}$ Hz, $\omega_R = 2,147 \times 10^{11}$ Hz), en donde se tenían las siguientes:

- $\Delta\omega = 0 \implies \frac{\Delta\omega}{\omega_{cv}} = 0 \implies$ oscilaciones de amplitud 1/2 (coeficientes de 0 a 1).

- $\Delta\omega = 2\omega_R \implies \frac{\Delta\omega}{\omega_{cv}} = 2,825 \times 10^{-4} \implies$ oscilaciones con amplitud $1/4$.
- $\Delta\omega = 2 \times 2\omega_R \implies \frac{\Delta\omega}{\omega_{cv}} = 5,650 \times 10^{-4} \implies$ oscilaciones con amplitud $< 1/8$.
- $\Delta\omega = 10 \times 2\omega_R \implies \frac{\Delta\omega}{\omega_{cv}} = 2,825 \times 10^{-3} \implies$ oscilaciones con amplitud $< 1/40$.

De este último resultado se puede concluir que basta un detuning $\sim 10^{-3}$ veces la frecuencia asociada a la energía de transición para llevar a las oscilaciones a ser prácticamente nulas.

En el caso del problema cuasi-1D habiéndose asumido una distribución de Fermi-Dirac, no se tiene información sobre cómo fue generado dicho poblamiento de bandas, pero se puede estimar un detuning para cada k dada una densidad electrónica n según los casos vistos (en comparación con $\frac{1}{\pi} \frac{2}{R}$); por comodidad y sin pérdida de generalidad se hará para $k = 0$. En general, de las Ecs. (1.2.78), (2.1.4), se tiene que:

$$\begin{aligned}\Delta\omega_{\mathbf{k}} &= \frac{(\epsilon_{e,\mathbf{k}} + \Sigma_{e,\mathbf{k}}) + (\epsilon_{h,\mathbf{k}} + \Sigma_{h,\mathbf{k}})}{\hbar} - \omega \\ &= \frac{(\epsilon_{e,\mathbf{k}} + \epsilon_{h,\mathbf{k}}) + (\Sigma_{e,\mathbf{k}} + \Sigma_{h,\mathbf{k}})}{\hbar} - \omega,\end{aligned}\tag{3.1.18}$$

siendo

$$\begin{aligned}\epsilon_{e,\mathbf{k}} + \epsilon_{h,\mathbf{k}} &= \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_c} + E_g + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_h} + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \\ &= \left(E_g + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right) + \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_c} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_h} \right).\end{aligned}\tag{3.1.19}$$

Con lo cual, para $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ se eliminan los términos cinéticos y queda el primer paréntesis, reinterpretable como:

$$\epsilon_{e,\mathbf{0}} + \epsilon_{h,\mathbf{0}} = E_g + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} =: \tilde{E}_g,\tag{3.1.20}$$

es decir, se puede definir una renormalización de la energía de gap \tilde{E}_g , en donde la cantidad $\sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \approx 4$ meV, pues equivale a resolver el problema de la sección anterior pero para banda llena (el valor $\Sigma_{max} \approx 4$ meV por Ec. (3.1.17)). Con esta definición de \tilde{E}_g , para $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, la Ec. (3.1.18) se convierte en:

$$\Delta\omega_{\mathbf{0}} = \frac{\tilde{E}_g + (\Sigma_{e,\mathbf{0}} + \Sigma_{h,\mathbf{0}})}{\hbar} - \omega.\tag{3.1.21}$$

Volviendo a la notación escalar -pues se está en cuasi-1D- y definiendo

$$\Sigma_0 := \Sigma_{e,0} = \Sigma_{h,0},\tag{3.1.22}$$

dado que las self-energies son iguales pues las poblaciones son iguales, entonces:

$$\Delta\omega_0 = \frac{\tilde{E}_g + 2\Sigma_0}{\hbar} - \omega. \quad (3.1.23)$$

Si desde esta simple expresión se elige una frecuencia de excitación $\omega = \tilde{E}_g/\hbar$, el detuning queda, sencillamente:

$$\Delta\omega_0 = \frac{2\Sigma_0}{\hbar}, \quad (3.1.24)$$

con lo cual, cada vez que se quiera relativizar una frecuencia de detuning con la de transición en $k = 0$, se tendrá:

$$\left| \frac{\Delta\omega_0}{\tilde{E}_g/\hbar} \right| = \left| \frac{2\Sigma_0}{\tilde{E}_g} \right|, \quad (3.1.25)$$

puesto que $\Sigma_{e,k}, \Sigma_{h,k} < 0 \ \forall \ k$.

Con todo esto, para los casos de la Fig. 12, tomándose las self-energies en $k = 0$ dadas por la aproximación de campo medio, y siendo $E_g = 1424 \text{ meV} \Rightarrow \tilde{E}_g = 1428 \text{ meV}$, se tienen los siguientes casos:

- $n = \frac{1}{\pi} \frac{2}{R} \times 10^{-2} << \frac{1}{\pi} \frac{2}{R} : |\Sigma_0| \approx 4 \times 10^{-2} \text{ meV} \Rightarrow \left| \frac{2\Sigma_0}{\tilde{E}_g} \right| \approx 5,5 \times 10^{-5}.$
- $n = \frac{1}{\pi} \frac{2}{R} \times 10^{-1} < \frac{1}{\pi} \frac{2}{R} : |\Sigma_0| \approx 4 \times 10^{-1} \text{ meV} \Rightarrow \left| \frac{2\Sigma_0}{\tilde{E}_g} \right| = 5,5 \times 10^{-4}.$
- $n \geq \frac{1}{\pi} \frac{2}{R} : |\Sigma_0| \approx 4 \text{ meV} \Rightarrow \left| \frac{2\Sigma_0}{\tilde{E}_g} \right| = 5,5 \times 10^{-3}.$

Como puede verse, en el caso de densidad más baja se tiene un detuning $\sim 10^{-5}$ veces la frecuencia asociada a la energía de transición en $k = 0$, con lo cual las oscilaciones de Rabi serán muy significativas, de amplitud $> 1/4$, ya que se está a un orden de magnitud por debajo del caso $\Delta\omega = 2\omega_R$ en el sistema de dos niveles, que era $\sim 10^{-4}$ respecto a la frecuencia asociada a la energía de transición. Para la densidad intermedia, esta relación trepa hasta $5,5 \times 10^{-4}$, un valor similar al caso de $\Delta\omega = 2 \times 2\omega_R$ para el sistema de dos niveles, lo que implica oscilaciones de amplitudes $\sim 1/8$. Por su parte, para la densidad más alta, se alcanza un detuning $\sim 10^{-3}$ con relación a la frecuencia asociada a la energía de transición, lo cual, haciendo la misma comparación, sitúa a las oscilaciones en amplitud $< 1/40$.

Este resultado arroja una predicción cualitativa que puede hacerse en caso de tener una distribución cualquiera en cuasi-1D, 2D y 3D: si se setean las condiciones iniciales tales que $n_{e,\mathbf{k}}(0) = 0 \ \forall \ \mathbf{k}$ y se elige la frecuencia del campo eléctrico para que coincida con la cantidad renormalizada \tilde{E}_g/\hbar , en el modelo no interactuante se generarán oscilaciones de Rabi completas en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, las cuales irán atenuándose en la medida que crezca el término cinético de la energía; en el modelo interactuante, en cambio, al aumentar un tanto la densidad de electrones promovidos en torno a $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ se espera que la self-energy generada

actúe como detuning, de modo que tenderá a atenuar la amplitud de las oscilaciones de Rabi allí y, por el contrario, en regiones en donde el término cinético actuaba de detuning natural, al ser las self-energías cantidades < 0 y al crecer en módulo éstas, se podrían generar oscilaciones de Rabi relativamente apreciables en dichas regiones separadas de $\mathbf{k} = 0$.

3.2. Caso distribución cualquiera en cuasi-1D

Para esta sección -y de aquí en adelante sin contar los apéndices- se utilizará como notación $k \equiv \mathbf{k}$, dado que todas las cantidades serán expresadas en una dimensión, a menos que haya que explicitar el cuasi-momento de manera vectorial para no perder generalidad. Las condiciones iniciales se asumirán:

$$\begin{cases} n_{e,k}(0) = 0, \\ n_{h,k}(0) = 0, \\ P_k(0) = 0. \end{cases} \quad (3.2.1)$$

Otros datos relevantes son:

- $E_g = 1424$ meV (datos de material GaAs);
- $m_h = 0,4 m_0 \wedge m_c = 0,067 m_0$, m_0 masa del electrón;
- parámetro lineal de red $a = 5,653 \text{ \AA}$, radio $R = 100 a$;
- intervalo de tiempo de estudio $[0; \tau]$, $\tau = 32$ ps;
- campo eléctrico de amplitud $E_0 = 287 \frac{\text{dyn}}{\text{esu}}$.

Con respecto a la frecuencia ω del campo eléctrico, la misma se tomará:

$$\omega = \frac{\tilde{E}_g}{\hbar}, \quad (3.2.2)$$

siendo \tilde{E}_g la dada por Ec. (3.1.20). Luego, como se indicó hacia el final de la sección anterior, es lógico pensar que al poblar la banda de conducción en la región en torno a $k = 0$ se generará un detuning lo suficientemente importante como para inhibir las oscilaciones de Rabi en dicha región; no obstante, al alejarse del entorno $k = 0$, las energías de electrón y hueco -que están dadas por Ec. (3.1.19)- pueden entrar en sintonía (parcial) con el campo, dado que las self-energías que se forman en los distintos k se

compensan con los términos cinéticos:

$$\begin{aligned}
\Delta\omega_k &= \frac{(\epsilon_{e,k} + \Sigma_{e,k}) + (\epsilon_{h,k} + \Sigma_{h,k})}{\hbar} - \omega \\
&= \frac{\tilde{E}_g + (\Sigma_{e,k} + \Sigma_{h,k}) + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}\right)}{\hbar} - \omega \\
&= \frac{\tilde{E}_g + (\Sigma_{e,k} + \Sigma_{h,k}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}}{\hbar} - \omega \\
&= \frac{(\Sigma_{e,k} + \Sigma_{h,k}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}}{\hbar},
\end{aligned} \tag{3.2.3}$$

siendo m_r la masa reducida del par electrón-hueco. Luego, existirá sintonía total para un dado k en caso de que el término cinético se equipare con la suma de self-energies:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} = \Sigma_{e,k} + \Sigma_{h,k}. \tag{3.2.4}$$

Recordando que, como máximo, cada self-energy puede valer $\approx 4 \text{ meV}$, esta resintonización entonces tiene un $|k|$ límite, el cual se da en aquella energía cinética máxima capaz de compensar la suma de las self-energies de electrón y hueco máximas:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} = 8 \text{ meV} \implies |k| = 1,098 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA}. \tag{3.2.5}$$

Considerando las condiciones iniciales dadas por Ec. (3.2.1) y los datos de material y campo eléctrico mencionados, esta predicción hecha por la Ec. (3.2.5) -de que existe un $|k|$ máximo que podrá experimentar una sintonía plena con el campo- puede visualizarse en las Figs. 13, 14, en donde se han graficado las superficies de nivel correspondientes a $n_{e,k}(t)$ y $|P_k(t)|$, respectivamente, para el problema interactuante resuelto numéricamente con el método de Runge-Kutta 4 (RK4). Para esta simulación, la semi-discretización en k se hizo mediante parámetro $Q = 1 \times 10^3 / \dim(k) = 2Q + 1$, mientras que t se partió en $N = 1 \times 10^5$ particiones.

Bajo la misma discretización del problema pero focalizando la simulación en tiempos más tempranos (Fig. 15), puede verse el comportamiento "deslocalizado" de las oscilaciones de Rabi, las cuales van "propagándose" a través de los distintos k en función de la sintonía que se va obteniendo con la frecuencia del campo eléctrico; esto es debido a la renormalización de las energías de electrón y hueco vía self-energies. Volviendo al panorama más ampliado que presenta la Fig. 13, puede apreciarse cómo el fenómeno de poblamiento electrónico pierde la armonía que presentaba en el modelo sin interacción coulombiana (Fig. 6), en donde cada electrón se comportaba como si estuviera sometido a un problema de dos niveles individual en función de su propio detuning (Fig. 1). En el caso interactuante, las oscilaciones en un estado $|\lambda, \mathbf{k}\rangle$ nunca llegan a ser armónicas pues la renormalización de la self-energy detunea el estado con respecto a la frecuencia del

campo y por tanto cambia la amplitud de oscilación; simultáneamente se da la renormalización de la frecuencia generalizada de Rabi (Ec. (1.2.86)), lo que afecta a la frecuencia de oscilación del $|\lambda, \mathbf{k}\rangle$. Este permanente juego de cambios de amplitud y frecuencia hace que sea muy difícil dotar al estado de una función suave que describa la población de electrones y huecos en función del tiempo.

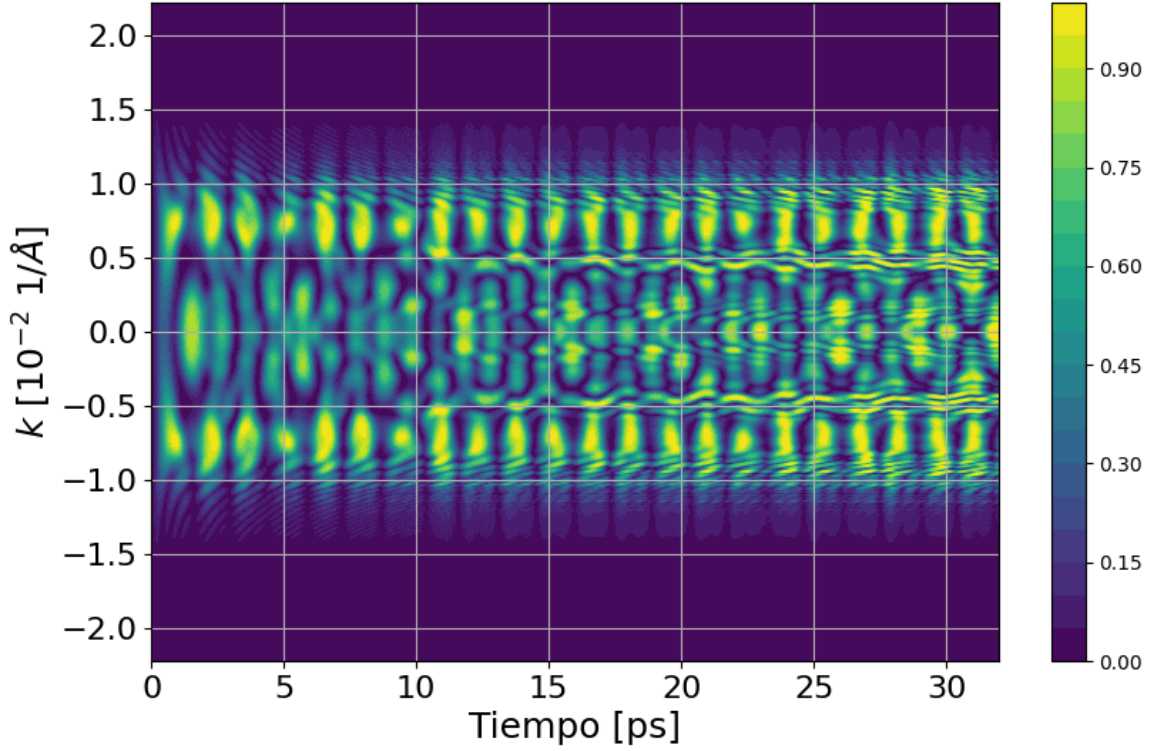


Figura 13: Superficie de nivel de $n_{e,k}(t)$. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = \tilde{E}_g/\hbar$, siendo $\tilde{E}_g = E_g + \sum_{q \neq 0} V_q$, $E_g = 1424$ meV (material *GaAs*), $\sum_{q \neq 0} V_q \approx 4$ meV, de modo que excite sin detuning a los electrones con $k = 0$ en una fase temprana.

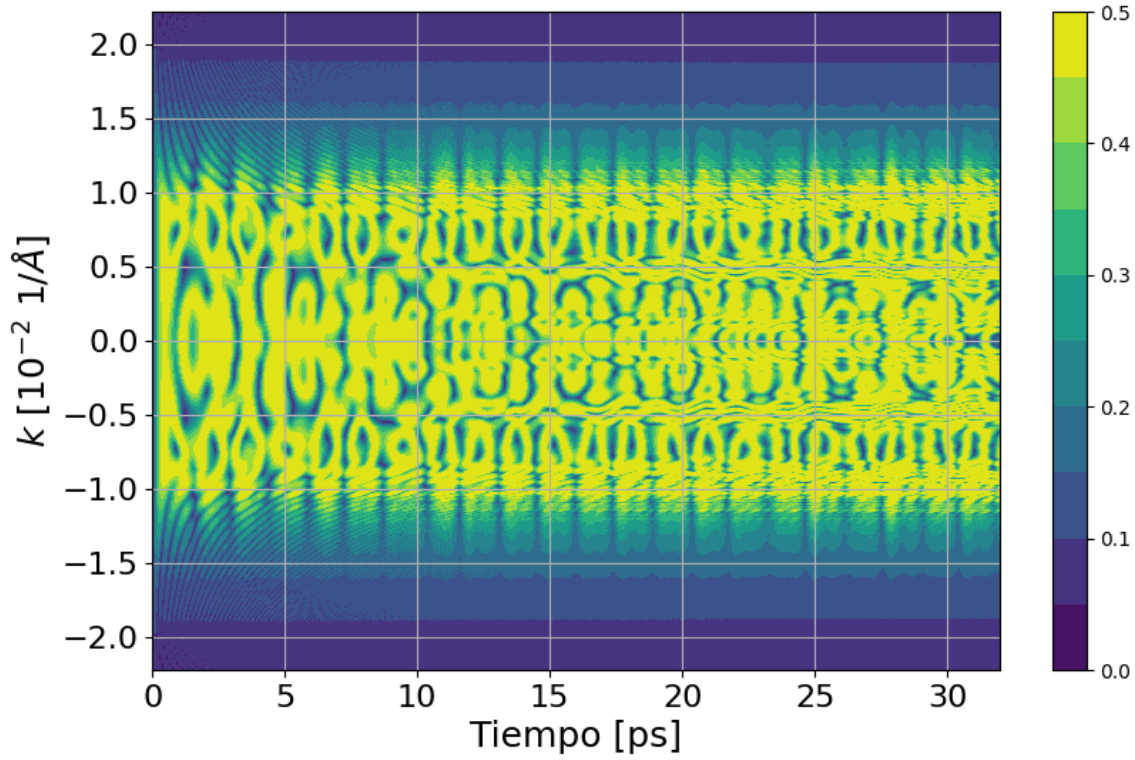


Figura 14: Superficie de nivel de $|P_k(t)|$. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = \tilde{E}_g/\hbar$, siendo $\tilde{E}_g = E_g + \sum_{q \neq 0} V_q$, $E_g = 1424$ meV (material *GaAs*), $\sum_{q \neq 0} V_q \approx 4$ meV, de modo que excite sin detuning a los electrones con $k = 0$ en una fase temprana.

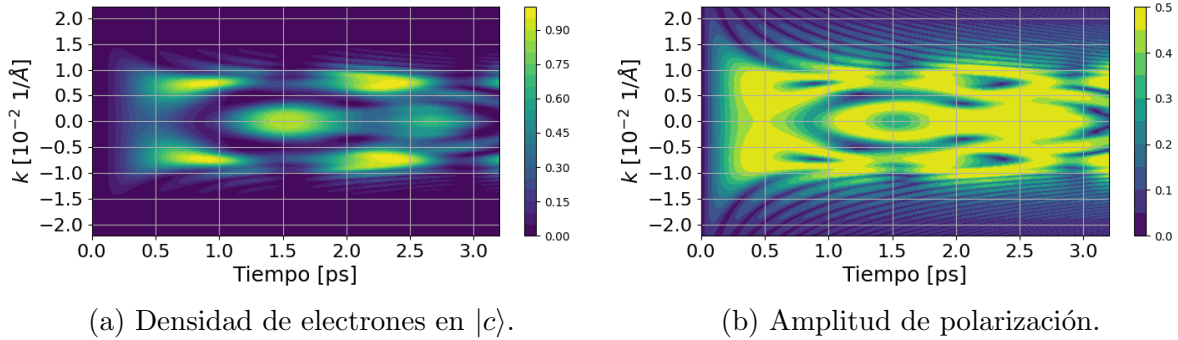


Figura 15: Superficies de nivel de (a) $n_{e,k}(t)$, (b) $|P_k(t)|$ para tiempos cortos. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = \tilde{E}_g/\hbar$, siendo $\tilde{E}_g = E_g + \sum_{q \neq 0} V_q$, $E_g = 1424$ meV (material *GaAs*), $\sum_{q \neq 0} V_q \approx 4$ meV, de modo que excite sin detuning a los electrones con $k = 0$ en una fase temprana.

4. Análisis y comparación entre modelos

Partiendo del hamiltoniano \mathcal{H}_0 dado por Ec. (1.2.50), el modelo de portadores no interactuantes proviene de desestimar la interacción coulombiana entre electrones promovidos a la banda de conducción, mientras que el modelo de portadores interactuantes, como es trivial, proviene de considerar dicha interacción.

En las Secciones 2 y 3 se ha simulado un sistema bajo el modelo de portadores no interactuantes entre sí (PNI) y un sistema bajo el de portadores interactuantes entre sí (PI), respectivamente, bajo las mismas condiciones (campo eléctrico, red, sintonización campo-bandas). Las Figs. 6, 7 (caso no interactuante) y 13, 14 (caso interactuante) muestran las evidentes diferencias entre un modelo incompleto y un modelo físicamente más realista. En esta sección se los analizará y comparará cualitativa y cuantitativamente, haciendo uso de la construcción de algunas definiciones que no existen en la literatura pero que sirven para caracterizar mejor el estudio.

4.1. Ancho de sintonía significativa

En el modelo de portadores no interactuantes el detuning se da únicamente por la diferencia entre $\omega_{eh,\mathbf{k}}$ (Ec. 2.1.4) y la frecuencia ω del campo eléctrico. Por ello, al estar en sintonía en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, las oscilaciones de Rabi decaen en amplitud conforme se consideran cuasi-momentos cada vez más lejanos al origen (la amplitud de las oscilaciones se comporta tal cual el problema de dos niveles; esto ocurre para cada \mathbf{k} por separado). Bajo las mismas condiciones (ω en sintonía con la frecuencia asociada a $\mathbf{k} = \mathbf{0}$), en el modelo de portadores interactuantes ello no ocurre sino hasta pasado el límite dado por Ec. (3.2.5). Cualitativamente, puede verse en las Figs. 6 y 13 que existe un "ancho" de cuasi-momentos por encima del cual las oscilaciones se vuelven relativamente pequeñas y, a partir de allí, aumentando en $|k|$, decrecen hasta volverse poco apreciables. En el estudio del problema de dos niveles se había visto que para una población inferior a 1/4 del total, la amplitud de la oscilación de Rabi era a su vez menor a 1/4 veces la amplitud de la oscilación con población completa (i.e. oscilación de amplitud $< 1/8$).

Se define el **ancho de sintonía significativa**, notado como $\Delta k^{(T)}$:

$$\Delta k^{(T)} := k_s^{(T)} - k_i^{(T)}, \quad (4.1.1)$$

i.e., la diferencia entre extremos del intervalo de cuasi-momentos $I^{(T)} = [k_i^{(T)}; k_s^{(T)}]$, el cual cumple:

$$\forall k \in 1ZB \setminus I^{(T)} : \langle n_{e,k}(\cdot) \rangle < \frac{1}{8}, \quad (4.1.2)$$

con $\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle$ el valor medio temporal para cada k en todo el intervalo temporal τ :

$$\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt n_{e,k}(t). \quad (4.1.3)$$

Lo que manifiesta Ec. (4.1.2) es que $k_i^{(T)}, k_s^{(T)}$ son los cuasi-momentos mínimo y máximo, respectivamente, tales que la densidad electrónica, en promedio temporal, alcanza al menos $1/8$ (y, por consiguiente, si fuera una oscilación armónica alcanzaría $1/8$ de amplitud). Esto no significa que dentro de dentro de $I^{(T)}$ no pueda existir un $k / \langle n_{e,k}(\cdot) \rangle < 1/8$; el intervalo lo que garantiza es que por fuera de él esta cota al valor medio de la densidad electrónica no se superará nunca más.

Por simetría en torno a $k = 0$ del esquema de bandas del problema (Fig. 5), en caso de sintonizar con $k = 0$, es trivial ver que $k_i^{(T)} = -k_s^{(T)}$. Luego, en este caso, la Ec. (4.1.1) se reduce a:

$$\Delta k^{(T)} := 2 k_s^{(T)}, \quad (4.1.4)$$

que es lo que ocurre para los modelos no interactuante e interactuante estudiados, arrojando:

- PNI: $k_s^{(T)} = 0,776 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA} \implies \Delta k^{(T)} = 1,552 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA}$.
- PI: $k_s^{(T)} = 1,078 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA} \implies \Delta k^{(T)} = 2,156 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA}$.

En resumen, $\Delta k^{(T)}$ crece $\approx 39\%$ respecto al PNI.

4.2. Comportamiento oscilatorio en cuasi-momento de máxima sintonización inicial

En el modelo de portadores no interactuantes, al sintonizar la ω del campo con $k = 0$ allí se obtienen oscilaciones de Rabi completas para $n_{e,0}(t), n_{h,0}(t)$, así como puede verse que $|P_0(t)|$ se explica netamente por $Im[P_0(t)]$, dado que $Re[P_0(t)] = 0 \forall t \in [0; \tau]$. Estos resultados salen a la luz si en Ec. (2.1.5) se impone $k = 0$. En la Fig. 16 puede verse todo lo antedicho. En caso del modelo interactuante, como se manifiesta en Fig. 17, el detuning no nulo aparece al instante que van poblándose los distintos estados vecinos del $k = 0$, con lo cual no sólo se pierden las oscilaciones completas, sino que en las sucesivas renormalizaciones de la self-energy Σ_0 y de $\omega_{R,0}$ producen oscilaciones anarmónicas, de frecuencia y amplitud permanentemente cambiantes. Otro aspecto a descartar es que $Re[P_0(t)]$ oscila, también anarmónicamente, de tal manera que se compensa con $Im[P_0(t)]$ para cumplir $|P_0(t)| \leq 1/2 \forall t \in [0; \tau]$. Por último, vale la pena mencionar que el estado $|c, 0\rangle$ por momentos experimenta oscilaciones completas, lo cual ocurre cuando los estados vecinos se despueblan, pues ello genera una disminución de Σ_0 , lo que implica una mejora de la sintonización con ω .

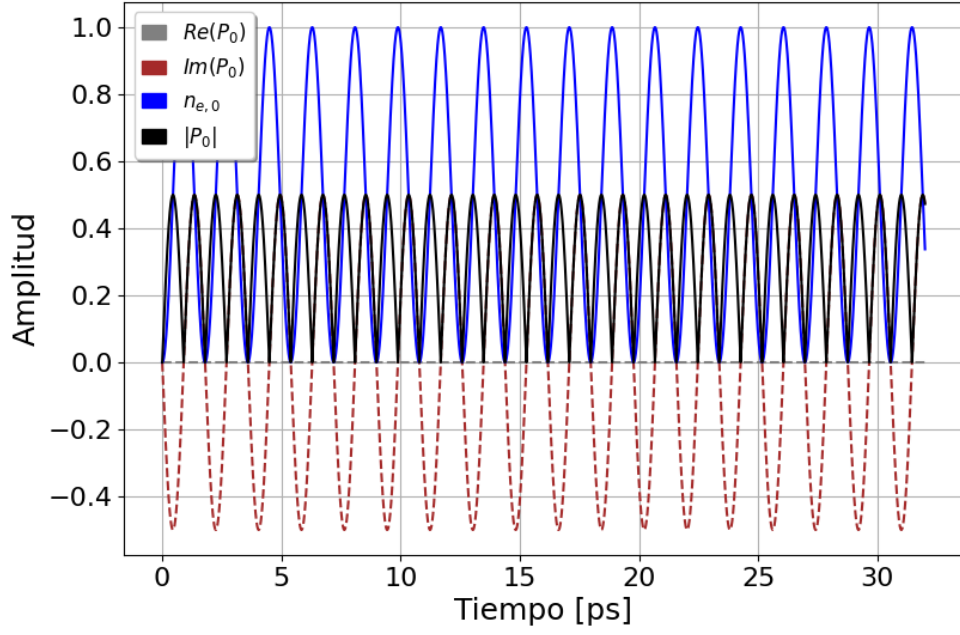


Figura 16: Amplitudes de $n_{e,0}(t)$, $Re[P_0(t)]$, $Im[P_0(t)]$, $|P_0(t)|$ en el modelo PNI. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = E_g/\hbar$, siendo $E_g = 1,424$ eV (material *GaAs*), de modo que excite sin *detuning* a los electrones con $k = 0$, generando en ellos oscilaciones de Rabi completas, de periodo $T_0 = 1,797$ ps, siendo $\omega_{R,0} = 1,748 \times 10^{12}$ Hz.

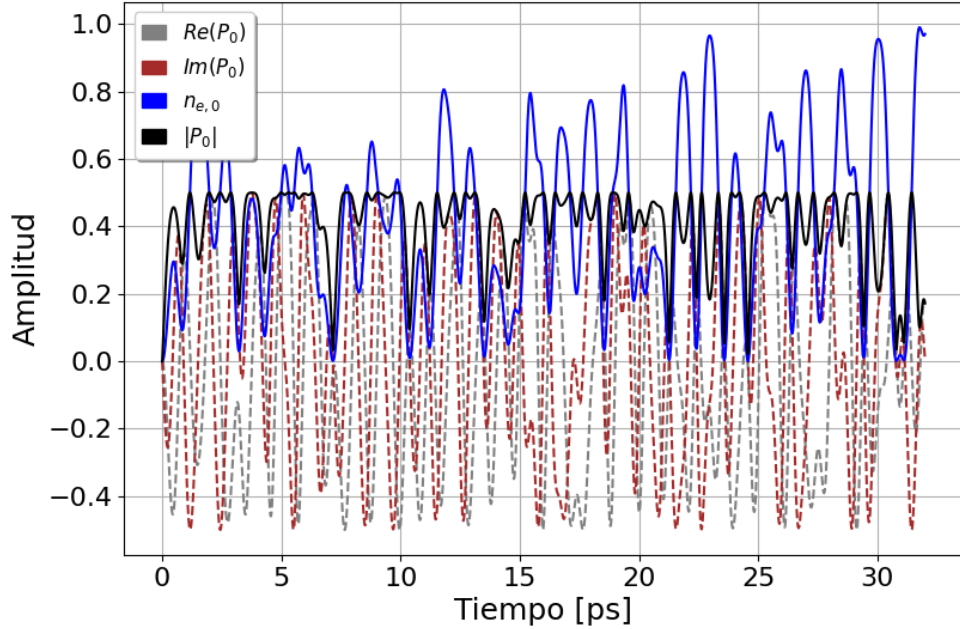


Figura 17: Amplitudes de $n_{e,0}(t)$, $Re[P_0(t)]$, $Im[P_0(t)]$, $|P_0(t)|$ en el modelo PI. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = \tilde{E}_g/\hbar$, siendo $\tilde{E}_g = E_g + \sum_{q \neq 0} V_q$, $E_g = 1424$ meV (material *GaAs*), $\sum_{q \neq 0} V_q \approx 4$ meV, de modo que excite sin *detuning* a los electrones con $k = 0$ en una fase temprana.

4.3. Estudio de amplitudes de oscilación dentro del intervalo de sintonía significativa

En el problema no interactuante, además de que todas las oscilaciones son armónicas, las amplitudes de oscilación decrecen conforme aumenta $|k|$; en el problema interactuante, en cambio, no hay una relación directa entre la monotonía de $|k|$ y la amplitud (variable) de las oscilaciones, siempre que se esté dentro del intervalo $I^{(T)}$.

Para realizar un estudio cualitativo, se consideran tres valores k_0, k_1, k_2 de cuasimomentos:

- $k_0 = 0$,
- $k_1 = 0, 225 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA}$,
- $k_2 = 0, 447 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA}$,

los cuales son tales que $k_0, k_1, k_2 \in I^{(T)}$ del problema no interactuante (luego, también pertenecen al $I^{(T)}$ homólogo del problema interactuante). Si se grafican las densidades $n_{e,k_0}(t), n_{e,k_1}(t), n_{e,k_2}(t)$ puede verse la monotonía en la caída de la amplitud conforme aumenta $|k|$ en el problema no interactuante (Fig. 18), mientras que ello no ocurre en el problema interactuante (Fig. 19).

Para generalizar la idea y comprobar la monotonía y no monotonía de los modelos de portadores no interactuantes e interactuantes, respectivamente, se consideran las Figs. 20, 21, en donde se ha graficado, en cada caso, las cantidades $\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle, \langle |P_k(\cdot)| \rangle$, tomando valor medio en el intervalo $[0; \tau]$ como indica Ec. (4.1.3), para la primera y

$$\langle |P_k(\cdot)| \rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt |P_k(t)|, \quad (4.3.1)$$

para la segunda. Además, en estas imágenes puede verse que los máximos de $\langle |P_k(\cdot)| \rangle$ coinciden con $\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle = 1/2$, disminuyendo cuando en promedio un estado se puebla o se despuebla, y con respecto a $\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle$:

- en PNI, se aprecia el máximo absoluto en torno a $k = 0$, disminuyendo monótonamente con forme $|k| \nearrow$;
- en PI, se dan un juego alternado de máximos y mínimos locales en la zona central del intervalo $I^{(T)}$, obteniéndose los máximos absolutos al acercarse al borde del mismo; esto se debe a que, como se comentó en Sección 3.2, existe un $|k|$ máximo a ser excitado sin detuning (Ec. (3.2.5)), así que por encima suyo ocurrirá que $\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle \searrow$, generando self-energies cada vez más bajas hacia la frontera de $I^{(T)}$ y permitiendo que se formen máximos absolutos de densidad de población promedio.

Para estudiar cuantitativamente el comportamiento oscilatorio dentro del intervalo $I^{(T)}$ de cada modelo, se consideran medidas de tendencia central y de dispersión para población y polarización en los cuasi-momentos particulares k_0, k_1, k_2 . Con Ecs. (4.1.3), (4.3.1) se pueden obtener valores medios para los k_0, k_1, k_2 , particularizando en cada cuasi-momento, y para analizar las fluctuaciones se consideran la varianza y la dispersión cuadrática media de $n_{e,k}(t), |P_k(t)|$:

$$\sigma_{n_{e,k}}^2 = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt (n_{e,k}(t) - \langle n_{e,k}(\cdot) \rangle)^2, \quad (4.3.2a)$$

$$\sigma_{n_{e,k}} = \sqrt{\sigma_{n_{e,k}}^2}. \quad (4.3.2b)$$

$$\sigma_{P_k}^2 = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt (|P_k(t)| - \langle |P_k(\cdot)| \rangle)^2, \quad (4.3.3a)$$

$$\sigma_{P_k} = \sqrt{\sigma_{P_k}^2}. \quad (4.3.3b)$$

En las Tablas I, II se muestran los resultados de las medidas de tendencia central y de dispersión mencionadas para $n_{e,k}(t)$ y $|P_k(t)|$ en cuasi-momentos k_0, k_1, k_2 , tanto para modelo de portadores no interactuantes como para interactuantes.

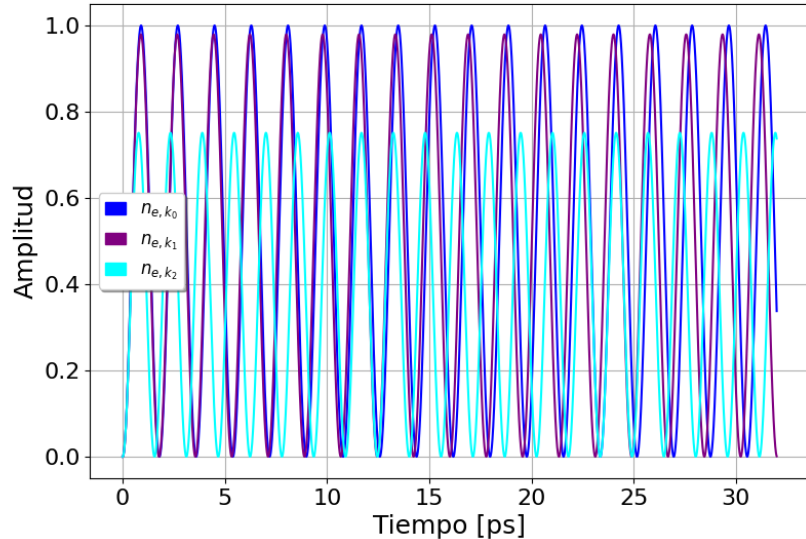


Figura 18: Comparación de amplitudes de $n_{e,k}(t)$ en $k_0 = 0, k_1 > k_0, k_2 > k_1$, con $k_0, k_1, k_2 \in I^{(T)}$, en el modelo de PNI. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = E_g/\hbar$, siendo $E_g = 1,424$ eV (material *GaAs*), de modo que excite sin *detuning* a los electrones con $k = 0$, generando en ellos oscilaciones de Rabi completas, de periodo $T_0 = 1,797$ ps, siendo $\omega_{R,0} = 1,748 \times 10^{12}$ Hz. En el resto de k se observan oscilaciones de Rabi incompletas y a mayor frecuencia.

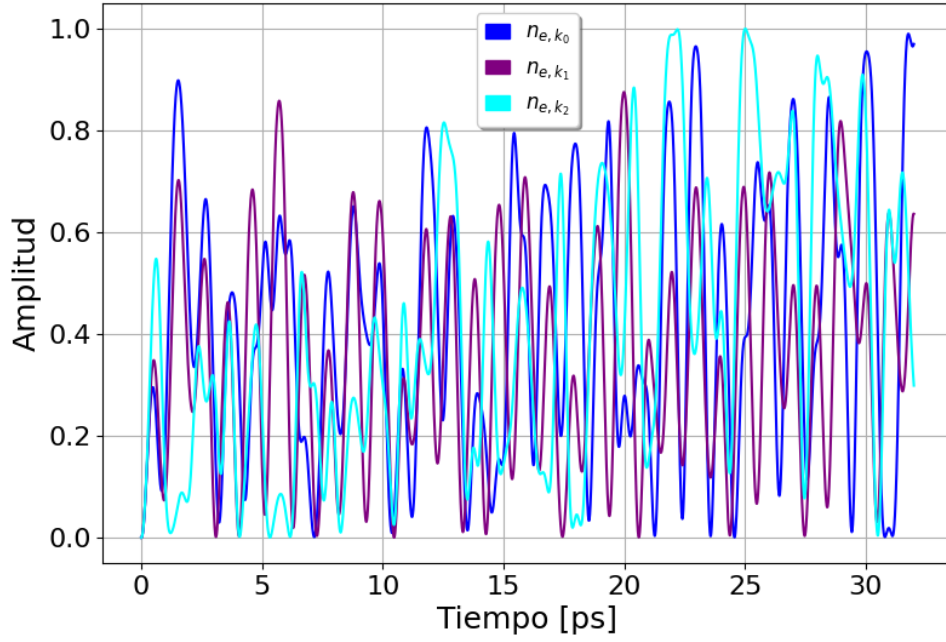


Figura 19: Comparación de amplitudes de $n_{e,k}(t)$ en $k_0 = 0$, $k_1 > k_0$, $k_2 > k_1$, con $k_0, k_1, k_2 \in I^{(T)}$, en el modelo de PI. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = \tilde{E}_g/\hbar$, siendo $\tilde{E}_g = E_g + \sum_{q \neq 0} V_q$, $E_g = 1424$ meV (material *GaAs*), $\sum_{q \neq 0} V_q \approx 4$ meV, de modo que excite sin detuning a los electrones con $k = 0$ en una fase temprana.

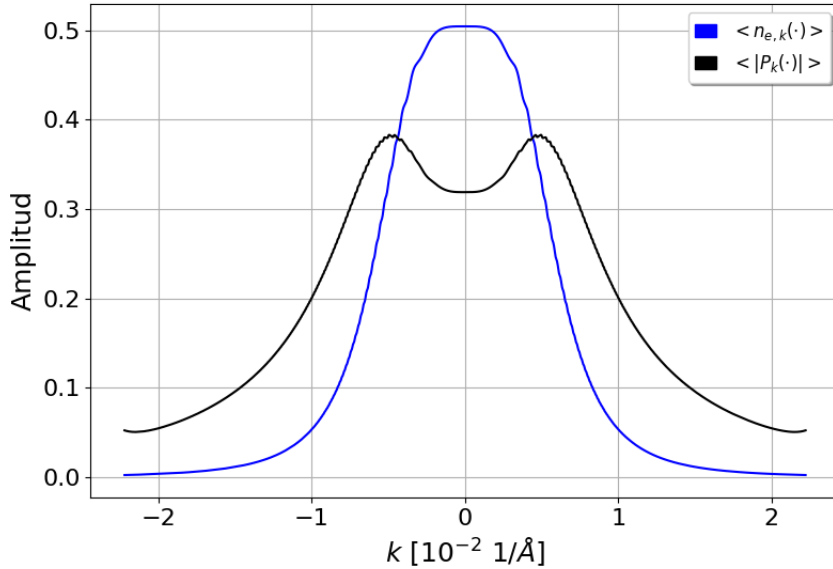


Figura 20: Valores medios temporales $\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle$, $\langle |P_k(\cdot)| \rangle$ en el modelo PNI. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = E_g/\hbar$, siendo $E_g = 1,424$ eV (material *GaAs*), de modo que excite sin *detuning* a los electrones con $k = 0$, generando en ellos oscilaciones de Rabi completas, de periodo $T_0 = 1,797$ ps, siendo $\omega_{R,0} = 1,748 \times 10^{12}$ Hz.

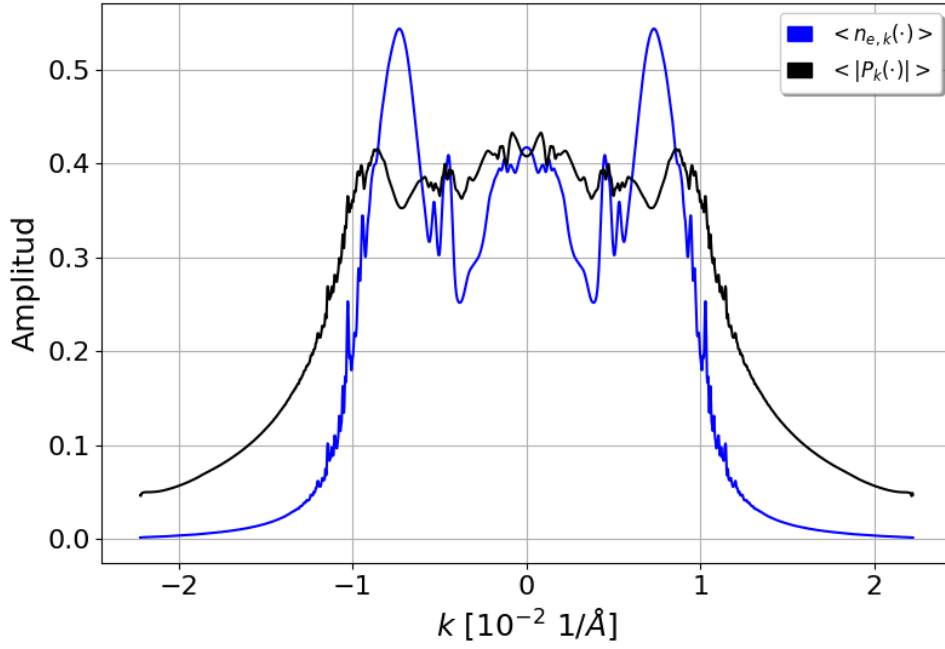


Figura 21: Valores medios temporales $\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle$, $\langle |P_k(\cdot)| \rangle$ en el modelo PI. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = \tilde{E}_g/\hbar$, siendo $\tilde{E}_g = E_g + \sum_{q \neq 0} V_q$, $E_g = 1424$ meV (material *GaAs*), $\sum_{q \neq 0} V_q \approx 4$ meV, de modo que excite sin detuning a los electrones con $k = 0$ en una fase temprana.

k	Portadores no interactuantes			Portadores interactuantes		
	$\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle$	$\sigma_{n_{e,k}}^2$ [$\times 10^{-1}$]	$\sigma_{n_{e,k}}$	$\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle$	$\sigma_{n_{e,k}}^2$ [$\times 10^{-1}$]	$\sigma_{n_{e,k}}$
k_0	0,504	1,246	0,353	0,417	0,653	0,256
k_1	0,490	1,198	0,346	0,350	0,454	0,213
k_2	0,376	0,707	0,266	0,407	0,748	0,274

Tabla I: Medidas de tendencia central y de dispersión para $n_{e,k}(t)$ en k_0, k_1, k_2 .

k	Portadores no interactuantes			Portadores interactuantes		
	$\langle P_k(\cdot) \rangle$	$\sigma_{P_k}^2$ [$\times 10^{-1}$]	σ_{P_k}	$\langle P_k(\cdot) \rangle$	$\sigma_{P_k}^2$ [$\times 10^{-1}$]	σ_{P_k}
k_0	0,319	0,237	0,154	0,408	0,117	0,108
k_1	0,336	0,195	0,140	0,413	0,112	0,106
k_2	0,381	0,196	0,139	0,391	0,135	0,116

Tabla II: Medidas de tendencia central y de dispersión para $|P_k(t)|$ en k_0, k_1, k_2 .

4.4. Densidad electrónica y polarización por unidad de longitud

A tiempo t , se definen, respectivamente, la densidad electrónica y la polarización por unidad de longitud como:

$$\langle n_{e,\cdot}(t)/L \rangle = \int_{1ZB} dk \, n_{e,k}(t), \quad (4.4.1)$$

$$\langle |P(t)|/L \rangle = \int_{1ZB} dk \, |P_k(t)|. \quad (4.4.2)$$

Estas cantidades se representan en las Figs. 22, 23 para el problema no interactuante y el interactuante, respectivamente, en donde puede verse, como viene ocurriendo en todos los análisis comparativos, que en el modelo no interactuante los comportamientos son cuasi-armónicos (una vez el sistema deja atrás las condiciones iniciales, i.e. entra en régimen estacionario), mientras que en el interactuante son anarmónicos (también se ve un régimen transitorio que se abandona luego de transcurrido cierto tiempo). Luego, como en la sección anterior, se pueden calcular medidas temporales de tendencia central y de dispersión:

$$\langle n_{e,\cdot}(\cdot)/L \rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \, \langle n_{e,\cdot}(t)/L \rangle, \quad (4.4.3a)$$

$$\langle |P(\cdot)|/L \rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \, \langle |P(t)|/L \rangle. \quad (4.4.3b)$$

$$\sigma_{n_e/L}^2 = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \, (\langle n_{e,\cdot}(t)/L \rangle - \langle n_{e,\cdot}(\cdot)/L \rangle)^2, \quad (4.4.4a)$$

$$\sigma_{n_e/L} = \sqrt{\sigma_{n_e/L}^2}. \quad (4.4.4b)$$

$$\sigma_{P/L}^2 = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \, (\langle |P(t)|/L \rangle - \langle |P(\cdot)|/L \rangle)^2, \quad (4.4.5a)$$

$$\sigma_{P/L} = \sqrt{\sigma_{P/L}^2}. \quad (4.4.5b)$$

Los resultados de aplicar Ecs. (4.4.3), (4.4.4), (4.4.5) pueden verse en la Tabla III, tanto para el modelo de portadores no interactuantes como interactuantes. En ellos puede verse una mayor densidad de población electrónica por unidad de longitud para el modelo de portadores interactuantes, así como una mayor fluctuación, lo cual tiene sentido de ser, puesto que el intervalo $I^{(T)}$ es más amplio.

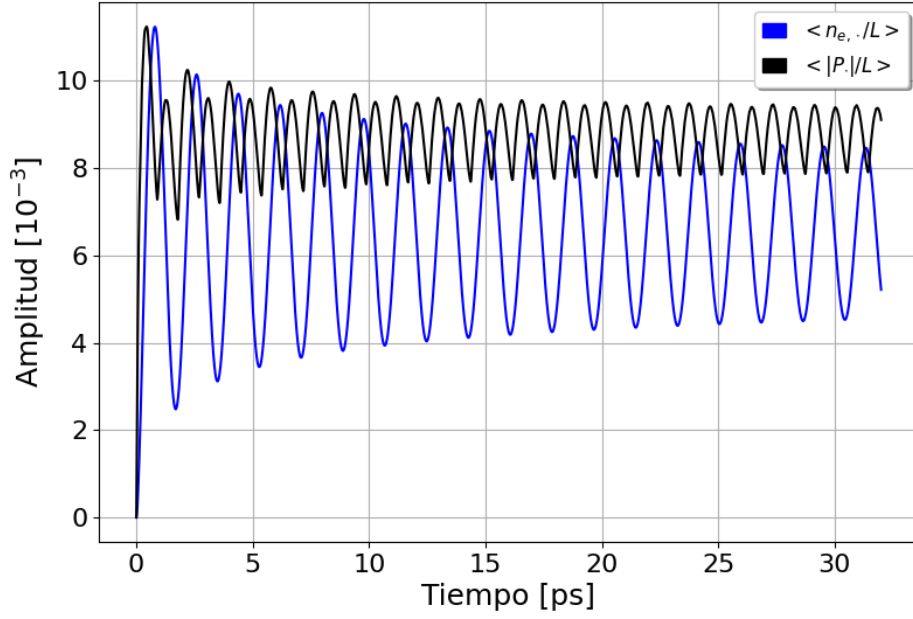


Figura 22: Valores medios $\langle n_{e,\cdot}(t)/L \rangle$, $\langle |P_{\cdot}(t)|/L \rangle$ en el modelo PNI. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = E_g/\hbar$, siendo $E_g = 1,424$ eV (material *GaAs*), de modo que excite sin *detuning* a los electrones con $k = 0$, generando en ellos oscilaciones de Rabi completas, de periodo $T_0 = 1,797$ ps, siendo $\omega_{R,0} = 1,748 \times 10^{12}$ Hz.

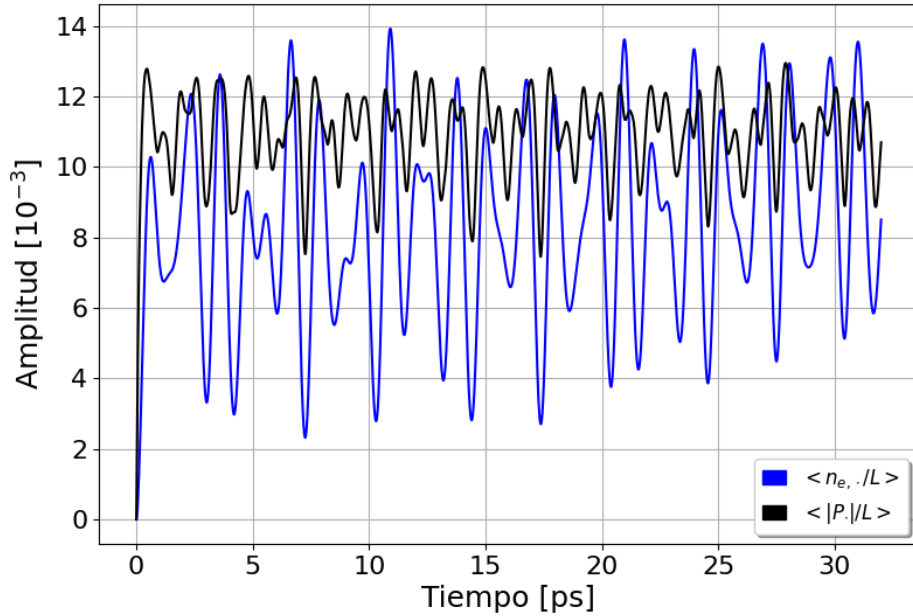


Figura 23: Valores medios $\langle n_{e,\cdot}(t)/L \rangle$, $\langle |P_{\cdot}(t)|/L \rangle$ en el modelo PI. El campo eléctrico es de amplitud $E_0 = 287$ dyn/esu y se eligió frecuencia $\omega = \tilde{E}_g/\hbar$, siendo $\tilde{E}_g = E_g + \sum_{q \neq 0} V_q$, $E_g = 1424$ meV (material *GaAs*), $\sum_{q \neq 0} V_q \approx 4$ meV, de modo que excite sin *detuning* a los electrones con $k = 0$ en una fase temprana.

X	Portadores no interactuantes			Portadores interactuantes		
	$\langle X(\cdot)/L \rangle$ [$\times 10^{-3}$ 1/Å]	$\sigma_{X/L}^2$ [$\times 10^{-6}$ 1/Å ²]	$\sigma_{X/L}$ [$\times 10^{-3}$ 1/Å]	$\langle X(\cdot)/L \rangle$ [$\times 10^{-3}$ 1/Å]	$\sigma_{X/L}^2$ [$\times 10^{-6}$ 1/Å ²]	$\sigma_{X/L}$ [$\times 10^{-3}$ 1/Å]
n_e	6, 517	3, 557	1, 886	8, 326	7, 360	2, 713
$ P $	8, 790	0, 565	0, 752	10, 930	1, 422	1, 192

Tabla III: Medidas de tendencia central y de dispersión para $\langle n_{e,\cdot}(t)/L \rangle$, $\langle |P(t)|/L \rangle$ en los modelos PNI y PI.

5. Conclusiones

Se ha estudiado un problema *many-body* partiéndose de modelos sencillos que fueron complejizándose, ganando realismo físico. A modo de mensaje coloquial, puede decirse que el estudio de partícula en sistema de dos niveles representa el problema "a orden cero"; luego, el problema many-body de portadores de carga no interactuantes entre sí sería un modelo de bajo nivel, mientras que el problema many-body de portadores de carga interactuantes entre sí sería un modelo de nivel medio (en Sección 6 se da una propuesta para aumentar aún más la complejidad del modelo, y con ello su realismo físico).

Los resultados parciales que se fueron obteniendo sirvieron de base para predicciones sobre el modelo más complejo estudiado, el de portadores de carga interactuantes entre sí, el cual conservó ciertas raíces de comportamiento provenientes del inmediato modelo más sencillo, el de portadores no interactuantes entre sí.

Del hamiltoniano del problema many-body se llegó a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (Ec. (1.2.88)), las cuales son las Ecuaciones de Semiconductor de Bloch (SBE) con excitación óptica monocromática, pero descontando términos de interacción por colisiones entre portadores de carga. Las ecuaciones a resolver correspondían a densidad de electrones n_e y huecos n_h en las bandas de conducción y valencia, respectivamente, y a la polarización P , todo en función del tiempo t y del cuasi-momento k . La forma de las ecuaciones permitieron hacer $n_{e,k}(t) = n_{h,k}(t)$, de modo que bastó con resolver la ecuación para n_e .

5.1. Problema de única partícula en sistema de dos niveles

- Una partícula en interacción dipolar con un campo eléctrico de amplitud E_0 y frecuencia ω , experimentará oscilaciones entre estados $|v\rangle$, $|c\rangle$ con una frecuencia Ω_R dada por Ec. (1.1.21); son las llamadas oscilaciones de Rabi.
- La amplitud y la frecuencia de estas oscilaciones dependerán del detuning entre ω y ω_{cv} , la frecuencia de transición entre estados dada por Ec. (1.1.2).

- Para detuning nulo se tendrá la máxima amplitud, correspondiente a oscilaciones completas entre estados (inversión de población), con frecuencia de oscilación $2\omega_R$.
- Se analizaron detunings múltiplos de $2\omega_R$, observándose que para un detuning $\Delta\omega = 2 \times 2\omega_R$ la amplitud de las oscilaciones decae a menos de $1/4$ de la máxima amplitud.

5.2. Problema many-body de portadores no interactuantes entre sí

- Si al hamiltoniano \mathcal{H}_0 (Ec. (1.2.50)) se le anulan los coeficientes de interacción coulombiana, se tiene un modelo de portados de carga no interactuantes entre sí, los cuales únicamente interactúan con el campo eléctrico (amplitud E_0 , frecuencia ω) y realizan transiciones interbanda que conservan el cuasi-momento, es decir entre estados $|v, \mathbf{k}\rangle, |c, \mathbf{k}\rangle, \mathbf{k} \in 1ZB$.
- El problema pudo ser resuelto de manera exacta a partir de Ec. (2.1.3), obteniéndose funciones $n_e, n_h, Re(P), Im(P)$ dadas por Ec. (2.1.5).
- Se simuló un caso con detuning nulo en $k = 0$. El fenómeno se comportó como un conjunto de problemas de partícula única en sistemas de dos niveles con detuning dependiente del cuasi-momento (Fig. 6). Bajo las condiciones de simulación (campo eléctrico sintonizado en $k = 0$, tiempo de aplicación, coindiciones iniciales), se dio que:
 - ancho de sintonía significativa fue $\Delta k^{(T)} = 1,552 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA}$;
 - se observaron oscilaciones de Rabi completas (amplitud máxima) en $k = 0$, con población y polarización variando armónicamente en el tiempo;
 - para $k = 0 : Re[P_0(t)] = 0 \ \forall t \in [0; \tau] \implies |Im[P_0(t)]| = |P_0(t)|$;
 - los máximos de $\langle |P_k(\cdot)| \rangle$ coinciden con $\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle = 1/2$, disminuyendo cuando en promedio un estado se puebla o se despuebla;
 - $\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle$ posee máximo absoluto en $k = 0$;
 - las amplitudes de oscilación decrecen monótonamente si $|k| \nearrow$ (aumentando el detuning), en tanto aumenta la frecuencia (ver datos en Tablas I, II);
 - $\langle n_{e,\cdot}(t)/L \rangle, \langle |Pe, \cdot(t)/L| \rangle$ alcanzan un régimen estacionario de oscilaciones cuasi-armónicas (ver Fig. 22).

5.3. Problema many-body de portadores interactuantes entre sí

- Aprovechando un modelo de distribución electrónica tipo Fermi-Dirac en cuasi-1D, se estimó la self-energy máxima que puede tener asociado un portador de carga

de cuasi-momento k en una cadena lineal atómica, la cual llega a valer $|\Sigma_{max}| = 3,922 \text{ meV} \approx 4 \text{ meV}$; este valor se da únicamente cuando se hallan promovidos todos los portadores vecinos de dicho k , por lo que son alcanzables por Coulomb.

- Con self-energies $|\Sigma| \sim 10^{-2} \times |\Sigma_{max}|$ alcanza para desintonizar tanto al estado que se obtienen oscilaciones prácticamente nulas asociadas a dicho estado.
- Existe un $|k|$ límite capaz de sintonizar con un campo cuya frecuencia fue seteada con detuning nulo en $k = 0$, el cual es $|k| = 1,098 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA}$.
- Se simuló un caso con detuning nulo en $k = 0$. Bajo las condiciones de simulación (campo eléctrico sintonizado en $k = 0$, tiempo de aplicación, coindiciones iniciales) idénticas a las de la simulación del problema many-body de portadores no interactuantes, obteniéndose:
 - intentos de oscilaciones de Rabi completas en $k = 0$, las cuales fueron atenuándose a medida que crecía la self-energy $|\Sigma_0|$ debido al poblamiento en la vecindad del estado, mientras que las regiones en donde el término cinético hubiera actuado como detuning natural (problema no interactuante), al ser $\Sigma_k < 0$, terminaban sintonizándose para dar oscilaciones apreciables (esto hasta $|k| = 1,098 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA}$), como puede verse en Fig. 13;
 - ancho de sintonía significativa en torno a 39% más grande que en el caso no interactuante, siendo $\Delta k^{(T)} = 2,156 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA}$;
 - oscilaciones anarmónicas de frecuencia y amplitud permanentemente cambiantes debido a las sucesivas renormalizaciones de la self-energy Σ_0 y de $\omega_{R,0}$;
 - $Re[P_0(t)]$ oscila, también anarmónicamente, de tal manera que se compensa con $Im[P_0(t)]$ para cumplir $|P_0(t)| \leq 1/2 \forall t \in [0; \tau]$;
 - los máximos de $\langle |P_k(\cdot)| \rangle$ coinciden con $\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle = 1/2$, disminuyendo cuando en promedio un estado se puebla o se despuebla;
 - se tiene un juego alternado de máximos y mínimos locales en la zona central del intervalo $I^{(T)}$, obteniéndose los máximos absolutos al acercarse al borde del mismo; esto se debe a que $|k| = 1,098 \times 10^{-2} \text{ 1/\AA}$ es el módulo máximo a ser excitado sin detuning (Ec. (3.2.5)), así que por encima suyo ocurrirá que $\langle n_{e,k}(\cdot) \rangle \searrow$, generando self-energies cada vez más bajas hacia la frontera de $I^{(T)}$ y permitiendo que se formen máximos absolutos de densidad de población promedio;
 - las amplitudes de oscilación no decrecen con el crecimiento de $|k|$, en tanto aumenta la frecuencia (ver datos en Tablas I, II);
 - $\langle n_{e,\cdot}(t)/L \rangle, \langle |Pe, \cdot(t)/L| \rangle$ alcanzan un régimen estacionario pero de oscilaciones anarmónicas (ver Fig. 23);
 - $\langle n_{e,\cdot}(\cdot)/L \rangle, \langle |P(\cdot)/L| \rangle \nearrow$ respecto al modelo PNI (ver datos en Tabla III).

6. Propuestas a futuro

- Probar proposición de relación causal: $\Delta k^{(T)} \nearrow \implies \langle n_{e,\cdot}(\cdot)/L \rangle, \langle |P(\cdot)/L| \rangle \nearrow$.
- Estudiar el mismo problema cuasi-1D pero alterando las condiciones iniciales y parámetros del campo eléctrico; por ejemplo sintonizarlo con un $k \neq 0$.
- Agregar al hamiltoniano \mathcal{H}_0 (Ec. (1.2.50)) un término de interacción por *scattering* entre electrones promovidos, de modo que se puedan dar transiciones intra-banda.
- Optimizar parámetros para buscar valores críticos y/o comportamientos deseados.
- Explorar casos particulares que permitan dar expresiones analíticas para $\Sigma_{e,k}, \Sigma_{h,k}$.
- Generalizar el problema a cuasi-2D y 3D, rescribiendo el potencial electrostático $V(\mathbf{r})$ y su respectiva transformada de Fourier $\hat{V}_{\mathbf{k}}$, en cada caso.
- Reformular el concepto de ancho de sintonía significativa $\Delta k^{(T)}$ hacia, por ejemplo, un "radio" (mínimo, máximo, promedio, etc.), tal que no dependa de la dimensión del problema.

A. Apéndice

A.1. Demostración identidad $d_{cv} = d_{vc}^*$

Sin pérdida de generalidad, la identidad se puede demostrar en una dimensión. Basta con ver que $\langle c|x|v\rangle = \langle v|x|c\rangle^*$:

$$\begin{aligned}
\langle c|x|v\rangle &= \langle c| id\ x\ id\ |v\rangle = \langle c| \left(\int dx'' |x''\rangle \langle x''| \right) x \left(\int dx' |x'\rangle \langle x'| \right) |v\rangle \\
&= \int dx'' \int dx' \langle c|x''\rangle \langle x''|x|x'\rangle \langle x'|v\rangle = \int dx'' \int dx' \langle c|x''\rangle x' \langle x''|x'\rangle \langle x'|v\rangle \\
&= \int dx'' \int dx' \langle c|x''\rangle x' \delta(x'' - x') \langle x'|v\rangle = \int dx' \langle c|x'\rangle x' \langle x'|v\rangle \\
&= \int dx' \langle x'|c\rangle^* x' \langle x'|v\rangle = \left(\int dx' \langle x'|v\rangle^* x' \langle x'|c\rangle \right)^* \\
&= \langle v|x|c\rangle^*.
\end{aligned}$$

Otra forma -mucho más sencilla- de ver que $\langle c|x|v\rangle = \langle v|x|c\rangle^*$ se basa en que x es operador hermítico:

$$\langle c|x|v\rangle = \langle c|x^\dagger|v\rangle = \langle v|x|c\rangle^*.$$

A.2. Inversión de población $W(t)$ en sistema de dos niveles

Se transcriben las Ecs. (1.1.24), (1.1.26):

$$\begin{cases} c_v(t) &= \left\{ c_v(0) \left[\cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) + i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \right] + i \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{i\phi} c_c(0) \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \right\} e^{-i\Delta\omega t/2} \\ c_c(t) &= \left\{ c_c(0) \left[\cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \right] + i \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{-i\phi} c_v(0) \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \right\} e^{i\Delta\omega t/2} \\ W(t) &= |c_c(t)|^2 - |c_v(t)|^2 \end{cases}$$

Para que operar algebraicamente se vuelva más sencillo, se consideran las siguientes definiciones:

$$\begin{cases} A := \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right), B := \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right), C := \frac{2\omega_R}{\Omega_R} \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \\ c_{v0} := c_v(0), c_{c0} := c_c(0) \end{cases}$$

Con esto, lo anterior se convierte en:

$$\begin{cases} c_v(t) &= [c_{v0} (A + iB) + i e^{i\phi} c_{c0} C] e^{-i\Delta\omega t/2} \\ c_c(t) &= [c_{c0} (A - iB) + i e^{-i\phi} c_{v0} C] e^{i\Delta\omega t/2} \end{cases}$$

Se definen:

$$\begin{cases} z_1 := [c_{v0} A - \sin(\phi)c_{c0} C] + i [c_{v0} B + \cos(\phi)c_{c0} C] \\ z_2 := [c_{c0} A + \sin(\phi)c_{v0} C] - i [c_{c0} B - \cos(\phi)c_{v0} C] \end{cases}$$

De modo que, para el coeficiente $c_v(t)$:

$$\begin{aligned} |c_v(t)|^2 &= [Re(z_1)]^2 + [Im(z_1)]^2 \\ &= c_{v0}^2 A^2 - 2c_{v0} A \sin(\phi)c_{c0} C + \sin^2(\phi)c_{c0}^2 C^2 \\ &\quad + c_{v0}^2 B^2 + 2c_{v0} B \cos(\phi)c_{c0} C + \cos^2(\phi)c_{c0}^2 C^2 \\ &= c_{v0}^2(A^2 + B^2) - 2c_{v0}c_{c0} [A \sin(\phi) - B \cos(\phi)] C + c_{c0}^2 C^2. \end{aligned} \quad (A.2.1)$$

Y de igual manera, para $c_c(t)$:

$$\begin{aligned} |c_c(t)|^2 &= [Re(z_2)]^2 + [Im(z_2)]^2 \\ &= c_{c0}^2(A^2 + B^2) + 2c_{c0}c_{v0} [A \sin(\phi) - B \cos(\phi)] C + c_{v0}^2 C^2. \end{aligned} \quad (A.2.2)$$

$$\implies W(t) = (c_{c0}^2 - c_{v0}^2)(A^2 + B^2) + 4 c_{c0}c_{v0} [A \sin(\phi) - B \cos(\phi)] C - (c_{c0}^2 - c_{v0}^2) C^2,$$

quedando

$$W(t) = (c_{c0}^2 - c_{v0}^2)(A^2 + B^2 - C^2) + 4 c_{c0}c_{v0} [A \sin(\phi) - B \cos(\phi)] C \quad (A.2.3)$$

Luego, si se toman condiciones iniciales $c_{v0} = 1 \wedge c_{c0} = 0 \implies W(t) = -(A^2 + B^2 - C^2)$, o sea:

$$W(t) = - \left[\frac{(\Delta\omega)^2 - (2\omega_R)^2}{\Omega_R^2} \sin^2 \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) + \cos^2 \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) \right] \quad (A.2.4)$$

A.3. Dipolo eléctrico $p(t)$ en sistema de dos niveles

Se transcriben las soluciones de la Ec. (1.1.24) junto con la equivalencia del dipolo eléctrico $p(t)$ en función de éstas:

$$\begin{cases} c_v(t) &= \left\{ c_v(0) \left[\cos \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) + i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \sin \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) \right] + i \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{i\phi} c_c(0) \sin \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) \right\} e^{-i\Delta\omega t/2} \\ c_c(t) &= \left\{ c_c(0) \left[\cos \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \sin \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) \right] + i \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{-i\phi} c_v(0) \sin \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right) \right\} e^{i\Delta\omega t/2} \\ p(t) &= c_c(t)c_v^*(t) d_{vc} e^{-i\omega_{cv}t} + c.c. \end{cases}$$

Llamando $A := c_c(t)c_v^*(t) d_{vc} e^{-i\omega_{cv}t}$, claramente $p(t) = A + c.c. = 2 \operatorname{Re}(A)$, con lo cual, para llegar a Ec. (1.1.29) basta ver que:

$$A = i |d_{cv}| \frac{2\omega_R}{\Omega_R} \left[\cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \right] \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) e^{-i\omega t}. \quad (\text{A.3.1})$$

Para operar algebraicamente de manera más sencilla, se definen:

$$\begin{cases} C := \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right), S := \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \\ c_{v0} := c_v(0), c_{c0} := c_c(0) / c_{v0}, c_{c0} \in \mathbb{R} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} A &= c_c(t) c_v^*(t) d_{vc} e^{-i\omega_{cv}t} = d_{vc} c_c(t) c_v^*(t) e^{-i\omega_{cv}t} \\ &= d_{vc} \left[c_{c0} \left(C - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} S \right) + i c_{v0} \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{-i\phi} S \right] e^{i\frac{\Delta\omega t}{2}} \\ &\cdot \left[c_{v0} \left(C - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} S \right) - i c_{c0} \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{-i\phi} S \right] e^{i\frac{\Delta\omega t}{2}} e^{-i\omega_{cv}t} \\ &= d_{vc} \left[c_{c0} \left(C - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} S \right) + i c_{v0} \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{-i\phi} S \right] \left[c_{v0} \left(C - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} S \right) - i c_{c0} \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{-i\phi} S \right] e^{-i\omega t}. \\ &= d_{vc} \left[c_{c0} c_{v0} \left(C - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} S \right)^2 - i (c_{c0}^2 - c_{v0}^2) \left(C - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} S \right) \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{-i\phi} S + \right. \\ &\quad \left. c_{c0} c_{v0} \left(\frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{-i\phi} S \right)^2 \right] e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

Aplicando condiciones iniciales $c_{v0} = 1 \wedge c_{c0} = 0$, lo anterior se reduce a:

$$\begin{aligned} A &= d_{vc} i \left(C - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} S \right) \frac{2\omega_R}{\Omega_R} e^{-i\phi} S e^{-i\omega t} \\ &= i |d_{cv}| e^{i\phi} \frac{2\omega_R}{\Omega_R} \left(C - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} S \right) S e^{-i\phi} e^{-i\omega t} \\ &= i |d_{cv}| \frac{2\omega_R}{\Omega_R} \left(C - i \frac{\Delta\omega}{\Omega_R} S \right) S e^{-i\omega t}, \end{aligned}$$

que es adonde se pretendía llegar (Ec. (A.3.1)).

A.4. Relación entre valores de expectación de operadores x y p

$$\text{Si } \mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x) / \mathcal{H} |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle \implies \langle \tilde{n} | [x, \mathcal{H}] |n\rangle = -(\epsilon_{\tilde{n}} - \epsilon_n) \langle \tilde{n} | x |n\rangle.$$

$$\text{Además: } [x, \mathcal{H}] = \frac{1}{2m} [x, p^2] = \frac{1}{2m} (p [x, p] + [x, p] p) = \frac{i\hbar}{m} p$$

$$\implies \langle \tilde{n} | \left(\frac{i\hbar}{m} p \right) |n\rangle = -(\epsilon_{\tilde{n}} - \epsilon_n) \langle \tilde{n} | x |n\rangle, \text{ llegándose a:}$$

$$\langle \tilde{n} | x | n \rangle = -\frac{i\hbar}{m(\epsilon_{\tilde{n}} - \epsilon_n)} \langle \tilde{n} | p | n \rangle. \quad (\text{A.4.1})$$

A.5. Operador \mathbf{p} aplicado a $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_\lambda(\mathbf{0};\mathbf{r})$

Se parte de Ec. (1.2.12), en donde \mathbf{p} se aplica a $\psi_\lambda(\mathbf{k};\mathbf{r})$. Si se toma $u_\lambda(\mathbf{k};\mathbf{r}) \approx u_\lambda(\mathbf{0};\mathbf{r}) =: u_\lambda$, lo cual es independiente de \mathbf{k} , luego:

$$\mathbf{p} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_\lambda = -i\hbar\nabla (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_\lambda) = -i\hbar (i\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_\lambda + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\nabla u_\lambda) = \hbar\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_\lambda + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{p} u_\lambda.$$

En resumen:

$$\mathbf{p} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_\lambda = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(\hbar\mathbf{k} + \mathbf{p}) u_\lambda. \quad (\text{A.5.1})$$

A.6. Ecuación de Liouville-Von Neumann para $\rho(t)$

$$\text{Si } \rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \implies \frac{d}{dt}\rho(t) = \left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right) \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \left(\frac{d}{dt}\langle \psi(t)|\right).$$

Como $\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}|\psi(t)\rangle$, luego:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}|\psi(t)\rangle\right) \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \left(\frac{i}{\hbar}\langle \psi(t)|\mathcal{H}\right) \\ &= -\frac{i}{\hbar}(\mathcal{H}|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| - |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|\mathcal{H}). \end{aligned}$$

Finalmente:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, \rho(t)]. \quad (\text{A.6.1})$$

A.7. Sistema de ecuaciones diferenciales para los $\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}, t)$

Como todas las operaciones se hacen para $(\mathbf{k};t)$ genéricos, se puede adoptar, sin pérdida de generalidad, una notación que no incluya referencias a \mathbf{k} , t , y así hacer más sencillo seguir el razonamiento. Con el mismo fin de economizar notación, se consideran $E(t) \equiv E$, $d_{\lambda\lambda'}$ escalares y se definen las diferencias de frecuencias $\omega_{\lambda\lambda'} = \omega_\lambda - \omega_{\lambda'}$.

$$\rho_{\mathbf{k}} = \sum_{\lambda, \lambda'} \rho_{\lambda\lambda'} |\lambda\rangle \langle \lambda'| \implies \rho_{\mathbf{k}}^{int} = \sum_{\lambda, \lambda'} e^{i\omega_{\lambda\lambda'}t} \rho_{\lambda\lambda'} |\lambda\rangle \langle \lambda'|.$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{\mathbf{k}}^{int} = \sum_{\lambda, \lambda'} \left(i\omega_{\lambda\lambda'} e^{i\omega_{\lambda\lambda'}t} \rho_{\lambda\lambda'} + e^{i\omega_{\lambda\lambda'}t} \frac{d}{dt}\rho_{\lambda\lambda'} \right) |\lambda\rangle \langle \lambda'|,$$

y desarrollando término a término:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_{\mathbf{k}}^{int} = & \frac{d}{dt}\rho_{vv} |v\rangle \langle v| + e^{-i\omega_{cv}t} \left(-i\omega_{cv}\rho_{vc} + \frac{d}{dt}\rho_{vc} \right) |v\rangle \langle c| + \\ & e^{i\omega_{cv}t} \left(i\omega_{cv}\rho_{cv} + \frac{d}{dt}\rho_{cv} \right) |c\rangle \langle v| + \frac{d}{dt}\rho_{cc} |c\rangle \langle c|. \end{aligned} \quad (\text{A.7.1})$$

Asimismo, desarrollando término a término la Ec. (1.2.32):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_{\mathbf{k}}^{int} = & \frac{i}{\hbar}E \sum_{\lambda, \lambda'} e^{i\omega_{\lambda\lambda'}t} \rho_{\lambda\lambda'} [e^{i\omega_{cv}t} d_{cv} (|c\rangle \langle v|\lambda\rangle \langle \lambda'| - |\lambda\rangle \langle \lambda'|c\rangle \langle v|) + \\ & e^{-i\omega_{cv}t} d_{cv}^* (|v\rangle \langle c|\lambda\rangle \langle \lambda'| - |\lambda\rangle \langle \lambda'|v\rangle \langle c|)] \\ = & \frac{i}{\hbar}E \sum_{\lambda, \lambda'} e^{i\omega_{\lambda\lambda'}t} \rho_{\lambda\lambda'} [(e^{i\omega_{cv}t} d_{cv} |c\rangle \langle v| + e^{-i\omega_{cv}t} d_{cv}^* |v\rangle \langle c|) |\lambda\rangle \langle \lambda'| - \\ & |\lambda\rangle \langle \lambda'| (e^{i\omega_{cv}t} d_{cv} |c\rangle \langle v| + e^{-i\omega_{cv}t} d_{cv}^* |v\rangle \langle c|)] \\ = & \frac{i}{\hbar}E [\rho_{vv} (e^{i\omega_{cv}t} d_{cv} |c\rangle \langle v| - e^{-i\omega_{cv}t} d_{cv}^* |v\rangle \langle c|) + \\ & e^{-i\omega_{cv}t} \rho_{vc} (e^{i\omega_{cv}t} d_{cv} |c\rangle \langle c| - e^{i\omega_{cv}t} d_{cv} |v\rangle \langle v|) + \\ & e^{i\omega_{cv}t} \rho_{cv} (e^{-i\omega_{cv}t} d_{cv}^* |v\rangle \langle v| - e^{-i\omega_{cv}t} d_{cv}^* |c\rangle \langle c|) + \\ & \rho_{cc} (e^{-i\omega_{cv}t} d_{cv}^* |v\rangle \langle c| - e^{i\omega_{cv}t} d_{cv} |c\rangle \langle v|)] \\ = & \frac{i}{\hbar}E [\rho_{vv} (e^{i\omega_{cv}t} d_{cv} |c\rangle \langle v| - h.c.) + \rho_{vc} d_{cv} (|c\rangle \langle c| - |v\rangle \langle v|) + \\ & \rho_{cv} d_{cv}^* (|v\rangle \langle v| - |c\rangle \langle c|) - \rho_{cc} (e^{i\omega_{cv}t} d_{cv} |c\rangle \langle v| - h.c.)]. \end{aligned}$$

Agrupando todo convenientemente en cada proyector $|\lambda\rangle \langle \lambda'|$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_{\mathbf{k}}^{int} = & \frac{i}{\hbar}E [(\rho_{vc}d_{cv} - \rho_{cv}d_{cv}^*) (|c\rangle \langle c| - |v\rangle \langle v|) + \\ & e^{i\omega_{cv}t} (\rho_{vv} - \rho_{cc}) d_{cv} |c\rangle \langle v| - e^{-i\omega_{cv}t} (\rho_{vv} - \rho_{cc}) d_{cv}^* |v\rangle \langle c|]. \end{aligned} \quad (\text{A.7.2})$$

Igualando término a término según cada proyector $|\lambda\rangle \langle \lambda'|$ en las Ecs. (A.7.1), (A.7.2), se tiene:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\rho_{vv} = -\frac{i}{\hbar}E (\rho_{vc}d_{cv} - \rho_{cv}d_{cv}^*) \\ \frac{d}{dt}\rho_{vc} = i\omega_{cv}\rho_{vc} - \frac{i}{\hbar}Ed_{cv}^* (\rho_{vv} - \rho_{cc}) \\ \frac{d}{dt}\rho_{cv} = -i\omega_{cv}\rho_{cv} + \frac{i}{\hbar}Ed_{cv} (\rho_{vv} - \rho_{cc}) \\ \frac{d}{dt}\rho_{cc} = \frac{i}{\hbar}E (\rho_{vc}d_{cv} - \rho_{cv}d_{cv}^*) \end{cases} \quad (\text{A.7.3})$$

A.8. Operadores en segunda cuantización

En esta sección auxiliar se intentará ser lo más resumido posible, además de utilizar una notación ligera; para una mayor profundización ver cita bibliográfica [9].

Dada una base de estados de una partícula $\{|u_l\rangle\}$, un estado de un sistema de fermiones consiste en enlistar los niveles ocupados: $|u_i; u_j; \dots; u_k; \dots\rangle$, siendo i, j, k conjuntos de números cuánticos.

Se define al operador de creación a^\dagger como aquél que:

$$a_i^\dagger |u_j; \dots; u_k; \dots\rangle := |u_i; u_j; \dots; u_k; \dots\rangle, \quad (\text{A.8.1})$$

es decir, crea una partícula en el estado $|u_i\rangle$. Asimismo se puede definir al operador destrucción a :

$$a_i |u_i; u_j; \dots; u_k; \dots\rangle := |u_j; \dots; u_k; \dots\rangle, \quad (\text{A.8.2})$$

ergo, aquél que desocupa el estado $|u_i\rangle$. Con éstos, es trivial poder definir:

$$n_i := a_i^\dagger a_i, \quad (\text{A.8.3})$$

operador número de ocupación (en estado $|u_i\rangle$), con lo cual se obtiene

$$N = \sum_i a_i^\dagger a_i, \quad (\text{A.8.4})$$

el operador número total de partículas.

Por principio de exclusión de Pauli, los operadores a_i^\dagger, a_i tienen que cumplir:

$$a_i^\dagger |\dots; u_{i-1}; u_i; u_{i+1}; \dots\rangle = 0, \quad (\text{A.8.5})$$

si el estado $|u_i\rangle$ está ocupado y

$$a_i |\dots; u_{i-1}; u_{i+1}; \dots\rangle = 0, \quad (\text{A.8.6})$$

si el estado $|u_i\rangle$ está desocupado. En otras palabras:

$$a_i^\dagger a_i^\dagger := 0 \wedge a_i a_i := 0. \quad (\text{A.8.7})$$

Los operadores de creación y destrucción cumplen las siguientes relaciones de anti-

conmutación:

$$\{a_\lambda, a_{\lambda'}^\dagger\} = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (\text{A.8.8a})$$

$$\{a_\lambda^\dagger, a_{\lambda'}^\dagger\} = 0, \quad (\text{A.8.8b})$$

$$\{a_\lambda, a_{\lambda'}\} = 0. \quad (\text{A.8.8c})$$

Aprovechando estas últimas, se pueden construir las relaciones de conmutación:

$$[a_\lambda, a_{\lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda\lambda'} - 2 a_{\lambda'}^\dagger a_\lambda, \quad (\text{A.8.9a})$$

$$[a_\lambda^\dagger, a_{\lambda'}^\dagger] = -2 a_{\lambda'}^\dagger a_\lambda^\dagger, \quad (\text{A.8.9b})$$

$$[a_\lambda, a_{\lambda'}] = -2 a_{\lambda'} a_\lambda. \quad (\text{A.8.9c})$$

A.8.1. Operadores de 1 partícula

Sea $\{|u_l\rangle\}$ una base de estados de una partícula. Sea f operador de 1 partícula. Sea $F = \sum_{q=1}^N f(q)$, operador que actúa como la identidad para $(N-1)$ partículas, salvo para la q -ésima en cada caso. Luego, en primera cuantización, F será:

$$F = \sum_{k,l} f_{kl} \sum_{q=1}^N |q : u_k\rangle \langle q : u_l|, \quad (\text{A.8.10})$$

con $f_{kl} = \langle u_k | f | u_l \rangle$. No obstante, en segunda cuantización F se escribe:

$$F = \sum_{k,l} f_{kl} a_k^\dagger a_l, \quad (\text{A.8.11})$$

y haciendo un cambio de base a la de autoestados $\{|f_l\rangle\}$ de f :

$$F = \sum_k f_k n_k. \quad (\text{A.8.12})$$

A.8.2. Operadores de 2 partículas

Sea $\{|u_l\rangle\}$ una base de estados de una partícula. Sea g un operador de 2 partículas, o sea $g = g(q; q')$ opera en el espacio producto de las partículas q, q' . Sea $G = \frac{1}{2} \sum_{q,q',q \neq q'}^N g(q; q')$, operador que actúa como identidad para $(N-2)$ partículas salvo para las q -ésima y q' -ésima, en cada caso. Se puede demostrar que, en segunda cuantización, G será:

$$G = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} g_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k, \quad (\text{A.8.13})$$

con $g_{ijkl} = \langle 1 : u_i; 2 : u_j | g(1; 2) | 1 : u_k; 2 : u_l \rangle$.

A.8.3. Operadores de campo

Se definen los operadores de campo:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_k \psi_k(\mathbf{r}) a_k, \quad (\text{A.8.14a})$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_k \psi_k^*(\mathbf{r}) a_k^\dagger, \quad (\text{A.8.14b})$$

siendo a_k, a_k^\dagger operadores de destrucción y creación de partículas en el estado $|u_k\rangle \in \{|u_l\rangle\}$, base de estados de una partícula, y $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | u_k \rangle$. Los operadores $\psi_k(\mathbf{r}) a_k$ y $\psi_k^*(\mathbf{r}) a_k^\dagger$ representan la destrucción y creación, respectivamente, de una partícula en un determinado estado $|u_k\rangle$ y en una posición \mathbf{r} .

Luego, de la Ec. (A.8.3) se puede construir el concepto de operador densidad de partículas:

$$n(\mathbf{r}) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}), \quad (\text{A.8.15})$$

del que se obtiene, análogamente a la Ec. (A.8.4), el número total de partículas integrando en \mathbf{r} :

$$N = \int d^3x \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}). \quad (\text{A.8.16})$$

Por su parte, los operadores de 1 y 2 partículas de las Ecs. (A.8.11), (A.8.13), respectivamente, se pueden reescribir:

$$F = \int d^3x \int d^3x' \langle \mathbf{r} | f | \mathbf{r}' \rangle \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}'), \quad (\text{A.8.17})$$

y

$$G = \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3x' \int d^3x'' \int d^3x''' \langle 1 : \mathbf{r}; 2 : \mathbf{r}' | g(1; 2) | 1 : \mathbf{r}''; 2 : \mathbf{r}''' \rangle \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}'') \Psi(\mathbf{r}'''). \quad (\text{A.8.18})$$

A.9. Ecuación de Heisenberg para operador número

La evolución temporal de cada operador número $n_{v,\mathbf{k}} = a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}$, $n_{c,\mathbf{k}} = a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}}$ se plantea a través de la ecuación de Heisenberg, en donde sólo contribuye el término del hamiltoniano $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I$ que tenga el mismo cuasi-momento \mathbf{k} . Se plantea el caso $n_{v,\mathbf{k}}$

(la resolución para $n_{c,\mathbf{k}}$ es totalmente análoga):

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} (a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}) &= [\mathcal{H}_{\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] \\
&= [\mathcal{H}_{0,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] + [\mathcal{H}_{I,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] \\
&= \epsilon_{v,\mathbf{k}} [a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] + \epsilon_{c,\mathbf{k}} [a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] + \\
&\quad \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V_{\mathbf{q}} \left\{ [a_{v,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{v,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] + \right. \\
&\quad \left. [a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] + 2 [a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] \right\} - \\
&\quad d_{cv} E(t) \left\{ [a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] + [a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] \right\}
\end{aligned} \tag{A.9.1}$$

Como los términos de energía cinética y de interacción dipolar no mezclan cuasi-momentos, para simplificar su resolución se puede ahorrar notación eliminando momentáneamente la etiqueta \mathbf{k} .

A.9.1. Resolución término de energía cinética

$$\begin{aligned}
\epsilon_v [a_v^\dagger a_v, a_v^\dagger a_v] + \epsilon_c [a_c^\dagger a_c, a_v^\dagger a_v] &= 0 + \epsilon_c [a_c^\dagger a_c, a_v^\dagger a_v] \\
&= \epsilon_c (a_v^\dagger [a_c^\dagger a_c, a_v] + [a_c^\dagger a_c, a_v^\dagger] a_v) \\
&= \epsilon_c (a_v^\dagger a_c^\dagger [a_c, a_v] + a_v^\dagger [a_c^\dagger, a_v] a_c + a_c^\dagger [a_c, a_v^\dagger] a_v + [a_c^\dagger, a_v^\dagger] a_c a_v) \\
&= \epsilon_c \left(-2a_v^\dagger a_c^\dagger a_v a_c - 2a_v^\dagger a_v a_c^\dagger a_c - 2a_c^\dagger a_v^\dagger a_c a_v - 2 \overbrace{a_v^\dagger a_c^\dagger a_v a_c}^{=-a_v^\dagger a_c^\dagger a_v a_c} \right) \\
&= (-2)\epsilon_c \left(a_v^\dagger a_v a_c^\dagger a_c + \overbrace{a_v^\dagger a_c^\dagger a_v a_c}^{=a_v^\dagger (\delta_{vc} - a_v a_c^\dagger) a_c} \right) \\
&= (-2)\epsilon_c (a_v^\dagger a_v a_c^\dagger a_c - a_v^\dagger a_v a_c^\dagger a_c) \\
&= 0 \\
\implies \epsilon_{v,\mathbf{k}} [a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] + \epsilon_{c,\mathbf{k}} [a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] &= 0.
\end{aligned} \tag{A.9.2}$$

A.9.2. Resolución término de interacción dipolar

Equivale a resolver:

$$\begin{aligned}
[a_c^\dagger a_v, a_v^\dagger a_v] + [a_v^\dagger a_c, a_v^\dagger a_v] &= a_c^\dagger [a_v, a_v^\dagger a_v] + [a_c^\dagger, a_v^\dagger a_v] a_v + a_v^\dagger [a_c, a_v^\dagger a_v] + [a_v^\dagger, a_v^\dagger a_v] a_c \\
&= a_c^\dagger a_v^\dagger \overbrace{[a_v, a_v]}^{=0} + a_c^\dagger [a_v, a_v^\dagger] a_v + a_v^\dagger [a_c^\dagger, a_v] a_v + [a_c^\dagger, a_v^\dagger] \overbrace{a_v a_v}^{=0} + \\
&\quad \overbrace{a_v^\dagger a_v^\dagger [a_c, a_v]}^{=0} + a_v^\dagger [a_c, a_v^\dagger] a_v + a_v^\dagger [a_v^\dagger, a_v] a_c + \overbrace{[a_v^\dagger, a_v^\dagger] a_v a_c}^{=0} \\
&= a_c^\dagger (\delta_{vv} - 2a_v^\dagger a_v) a_v + a_v^\dagger (\delta_{cv} - 2a_v a_c^\dagger) a_v + \\
&\quad a_v^\dagger (\delta_{cv} - 2a_v^\dagger a_c) a_v + a_v^\dagger (\delta_{vv} - 2a_v a_v^\dagger) a_c \\
&= a_c^\dagger a_v - 2a_c^\dagger a_v^\dagger \overbrace{a_v a_v}^{=0} - 2a_v^\dagger a_v a_c^\dagger a_v - 2 \overbrace{a_v^\dagger a_v^\dagger a_c a_v}^{=0} + a_v^\dagger a_c - 2a_v^\dagger a_v a_v^\dagger a_c \\
&= a_c^\dagger a_v - 2a_v^\dagger (\delta_{vc} - a_c^\dagger a_v) a_v + a_v^\dagger a_c - 2a_v^\dagger (\delta_{vv} - a_v^\dagger a_v) a_c \\
&= a_c^\dagger a_v + 2a_v^\dagger a_c^\dagger \overbrace{a_v a_v}^{=0} - 2a_v^\dagger a_c + a_v^\dagger a_c + 2 \overbrace{a_v^\dagger a_v^\dagger a_v a_c}^{=0} \\
&= a_c^\dagger a_v - a_v^\dagger a_c \\
&= a_c^\dagger a_v - (a_c^\dagger a_v)^\dagger \\
\implies \langle a_c^\dagger a_v \rangle - \langle (a_c^\dagger a_v)^\dagger \rangle &= P_{cv} - P_{cv}^* = 2i \text{Im}(P_{cv}) = -2i \text{Im}(P_{cv}^*) \\
\implies d_{cv} E(t) \left\{ \left\langle [a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] \right\rangle + \left\langle [a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}}, a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}}] \right\rangle \right\} &= -2i \text{Im} (d_{cv} E(t) P_{cv,\mathbf{k}}^*) .
\end{aligned} \tag{A.9.3}$$

A.9.3. Resolución del término de energía potencial electrostática

Aquí no se puede prescindir de las etiquetas del cuasi-momento, no obstante sí se puede -sin pérdida de generalidad- operar en una dimensión, se decir reemplazar $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}$ por k, k', q , respectivamente. Además, para aligerar la resolución, se plantean por separado:

$$V_1 = \frac{1}{2} \sum_{k', q \neq 0} V_q C_1, \tag{A.9.4a}$$

$$V_2 = \frac{1}{2} \sum_{k', q \neq 0} V_q C_2, \tag{A.9.4b}$$

$$V_3 = \sum_{k', q \neq 0} V_q C_3, \tag{A.9.4c}$$

siendo

$$C_1 = [a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k'} a_{v,k}, a_{v,k}^\dagger a_{v,k}] , \tag{A.9.5a}$$

$$C_2 = [a_{c,k+q}^\dagger a_{c,k'-q}^\dagger a_{c,k'} a_{c,k}, a_{v,k}^\dagger a_{v,k}] , \tag{A.9.5b}$$

$$C_3 = [a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k'} a_{c,k}, a_{v,k}^\dagger a_{v,k}] . \tag{A.9.5c}$$

En la resolución, siempre que aparezca un término tipo δ_{q0} se asumirá nulo, ya que $q = 0$ está explícitamente excluido de cada sumatoria.

$$\begin{aligned}
C_1 &= \left[a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k'} a_{v,k}, a_{v,k}^\dagger a_{v,k} \right] \\
&= a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k'} \overbrace{a_{v,k} a_{v,k}^\dagger}^{=1-a_{v,k}^\dagger a_{v,k}} a_{v,k} - a_{v,k}^\dagger \overbrace{a_{v,k} a_{v,k+q}^\dagger}^{=0-a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k}} a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k'} a_{v,k} \\
&= a_{v,k+q}^\dagger \overbrace{a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k'}}^{=0-a_{v,k'} a_{v,k'-q}^\dagger} a_{v,k} - a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k'} a_{v,k} \overbrace{a_{v,k}^\dagger a_{v,k}}^{=0} + a_{v,k}^\dagger a_{v,k+q}^\dagger \overbrace{a_{v,k} a_{v,k'-q}^\dagger}^{=\delta_{k(k'-q)}-a_{v,k'}^\dagger a_{v,k'-q}} a_{v,k} a_{v,k'} \\
&= -a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k'} a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k} + a_{v,k}^\dagger a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k+q} a_{v,k} - a_{v,k}^\dagger a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger \overbrace{a_{v,k} a_{v,k'}}^{=-a_{v,k'} a_{v,k}} a_{v,k} \\
&= -a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k'} a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k} - a_{v,k+q}^\dagger \overbrace{a_{v,k}^\dagger a_{v,k+q}}^{=0-a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k}} a_{v,k} + a_{v,k}^\dagger a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k'} \overbrace{a_{v,k} a_{v,k}}^{=0} \\
&= -a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k'} a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k} + a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k+q} a_{v,k}^\dagger a_{v,k}.
\end{aligned}$$

Luego, si se toma valor de expectación en todo C_1 y se aplican RPA y campo medio:

$$\begin{aligned}
\langle V_1 \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{k', q \neq 0} V_q \langle C_1 \rangle \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{k', q \neq 0} V_q \overbrace{\langle a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k'} a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k} \rangle}^{\approx \sum_{q \neq 0} V_q n_{v,k+q} n_{v,k}} + \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} V_q \overbrace{\langle a_{v,k+q}^\dagger a_{v,k+q} a_{v,k}^\dagger a_{v,k} \rangle}^{\approx \sum_{q \neq 0} V_q n_{v,k+q} n_{v,k}} \quad (\text{A.9.6}) \\
&\approx \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} V_q (-n_{v,k+q} n_{v,k} + n_{v,k+q} n_{v,k}) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_2 &= \left[a_{c,k+q}^\dagger a_{c,k'-q}^\dagger a_{c,k'} a_{c,k}, a_{v,k}^\dagger a_{v,k} \right] \\
&= a_{c,k+q}^\dagger a_{c,k'-q}^\dagger a_{c,k'} \overbrace{a_{c,k} a_{v,k}^\dagger}^{=0-a_{v,k}^\dagger a_{c,k}} a_{v,k} - a_{v,k}^\dagger \overbrace{a_{v,k} a_{c,k+q}^\dagger}^{=0-a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k}} a_{c,k'-q}^\dagger a_{c,k'} a_{c,k} \\
&= -a_{c,k+q}^\dagger a_{c,k'-q}^\dagger \overbrace{a_{c,k'} a_{v,k}^\dagger}^{=0-a_{v,k}^\dagger a_{c,k'}} a_{c,k} a_{v,k} + a_{v,k}^\dagger a_{c,k+q}^\dagger \overbrace{a_{v,k} a_{c,k'-q}^\dagger}^{=0-a_{c,k'-q}^\dagger a_{v,k}} a_{c,k'} a_{c,k} \\
&= a_{c,k+q}^\dagger a_{c,k'-q}^\dagger a_{v,k} a_{c,k'} a_{c,k} a_{v,k} - a_{v,k}^\dagger a_{c,k+q}^\dagger a_{c,k'-q}^\dagger a_{v,k} a_{c,k'} a_{c,k} \\
&= -a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k} a_{c,k'-q}^\dagger a_{c,k'} a_{c,k} a_{v,k} + a_{v,k}^\dagger a_{c,k+q}^\dagger a_{c,k'-q}^\dagger a_{c,k'} a_{v,k} a_{c,k} \\
&= a_{v,k}^\dagger a_{c,k+q}^\dagger a_{c,k'-q}^\dagger a_{c,k'} a_{c,k} a_{v,k} - a_{v,k}^\dagger a_{c,k+q}^\dagger a_{c,k'-q}^\dagger a_{c,k'} a_{c,k} a_{v,k} \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Con esto último, resulta trivial:

$$\langle V_2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k', q \neq 0} V_q \langle C_2 \rangle = 0. \quad (\text{A.9.7})$$

Por último, resta estudiar C_3 :

$$\begin{aligned} C_3 &= \left[a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k'} a_{c,k}, a_{v,k}^\dagger a_{v,k} \right] \\ &= a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k'} \underbrace{a_{c,k} a_{v,k}^\dagger}_{=0-a_{v,k}^\dagger a_{c,k}} a_{v,k} - a_{v,k}^\dagger \underbrace{a_{v,k} a_{c,k+q}^\dagger}_{=0-a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k}} a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k'} a_{c,k} \\ &= -a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger \underbrace{a_{v,k'} a_{v,k}^\dagger}_{=\delta_{k'k}-a_{v,k}^\dagger a_{v,k'}} a_{c,k} a_{v,k} + a_{v,k}^\dagger a_{c,k+q}^\dagger \underbrace{a_{v,k} a_{v,k'-q}^\dagger}_{=\delta_{k(k'-q)}-a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k}} a_{v,k'} a_{c,k} \\ &= -a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{c,k} a_{v,k} + a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k} a_{c,k} a_{v,k'} + \\ &\quad a_{v,k}^\dagger a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k+q} a_{c,k} - a_{v,k}^\dagger a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k'-q}^\dagger a_{v,k} a_{v,k'} a_{c,k} \end{aligned}$$

Los términos con seis operadores se anulan entre sí, al ubicar $a_{v,k}^\dagger$ a izquierda de todo en el primero y $a_{v,k}$ a derecha de todo en el segundo, dado que, por anticonmutación, aparecerán dos signos que se compensarán luego de cada permutación entre operadores de creación con creación y de destrucción con destrucción, respectivamente. El desarrollo queda entonces:

$$\begin{aligned} C_3 &= -a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k-q}^\dagger a_{c,k} a_{v,k} + a_{v,k}^\dagger a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k+q} a_{c,k} \\ &= a_{c,k+q}^\dagger \left(0 - a_{v,k} a_{v,k-q}^\dagger \right) a_{c,k} - a_{c,k+q}^\dagger \left(0 - a_{v,k+q} a_{v,k}^\dagger \right) a_{c,k} \\ &= -a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k} a_{v,k-q}^\dagger a_{c,k} + a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k+q} a_{v,k}^\dagger a_{c,k}. \end{aligned}$$

Asumiendo:

$$\begin{aligned} \left\langle a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k} a_{v,k-q}^\dagger a_{c,k} \right\rangle &\approx \left\langle a_{c,k}^\dagger a_{v,k} a_{v,k-q}^\dagger a_{c,k-q} \right\rangle \\ &\approx \left\langle a_{c,k}^\dagger a_{v,k} \right\rangle \left\langle a_{v,k-q}^\dagger a_{c,k-q} \right\rangle \\ &= P_{cv,k} P_{vc,k-q}, \end{aligned} \quad (\text{A.9.8})$$

$$\begin{aligned} \left\langle a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k+q} a_{v,k}^\dagger a_{c,k} \right\rangle &\approx \left\langle a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k+q} \right\rangle \left\langle a_{v,k}^\dagger a_{c,k} \right\rangle \\ &= P_{cv,k+q} P_{vc,k}, \end{aligned} \quad (\text{A.9.9})$$

luego:

$$\begin{aligned}
\langle V_3 \rangle &= \sum_{k', q \neq 0} V_q \langle C_3 \rangle \\
&= \sum_{q \neq 0} V_q \left(- \left\langle a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k} a_{v,k-q}^\dagger a_{c,k} \right\rangle + \left\langle a_{c,k+q}^\dagger a_{v,k+q} a_{v,k}^\dagger a_{c,k} \right\rangle \right) \\
&\approx \sum_{q \neq 0} V_q (-P_{cv,k} P_{vc,k-q} + P_{cv,k+q} P_{vc,k}) \\
&= \sum_{q \neq k} V_{k-q} (-P_{cv,k} P_{vc,q} + P_{cv,q} P_{vc,k}) \\
&= \sum_{q \neq k} V_{k-q} (-P_{cv,k} P_{cv,q}^* + P_{cv,q} P_{cv,k}^*) \\
&= \sum_{q \neq k} V_{k-q} [-(P_{cv,q} P_{cv,k}^*)^* + P_{cv,q} P_{cv,k}^*] \\
&= 2i \operatorname{Im} \left(\sum_{q \neq k} V_{k-q} P_{cv,q} P_{cv,k}^* \right).
\end{aligned} \tag{A.9.10}$$

A.10. Solución exacta a modelo de portadores no interactuantes entre sí

Se reescribe la Ec. (2.1.3) pero quitando las referencias al cuasimomento \mathbf{k} para economizar notación; asimismo, como $n_e = n_h$, se adopta la notación $n := n_e = n_h$. Luego, se puede plantear el siguiente sistema ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} R = -\Delta\omega I, \\ \frac{d}{dt} I = \Delta\omega R - \omega_R (1 - 2n), \\ \frac{d}{dt} n = -2 \omega_R I, \end{cases} \tag{A.10.1}$$

Matricialmente, este sistema es:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbb{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}, \tag{A.10.2}$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} R \\ I \\ n \end{bmatrix} \wedge \mathbb{A} = \begin{bmatrix} 0 & -\Delta\omega & 0 \\ \Delta\omega & 0 & 2\omega_R \\ 0 & -2\omega_R & 0 \end{bmatrix} \wedge \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\omega_R \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{A.10.3}$$

Para resolver el sistema homogéneo asociado, se plantea el polinomio característico y se buscan autovalores:

$$0 = P(\lambda) = \det(\lambda \operatorname{id} - \mathbb{A}) = \lambda^3 + (2\omega_R)^2 \lambda + (\Delta\omega)^2 \lambda = \lambda [\lambda^2 + (2\omega_R)^2 + (\Delta\omega)^2].$$

$$\text{Definiendo } \Omega_R := \sqrt{(2\omega_R)^2 + (\Delta\omega)^2} \implies 0 = \lambda(\lambda^2 + \Omega_R^2) \implies \lambda = 0 \vee \lambda = \pm i\Omega_R.$$

Para $\lambda = 0$, los autovectores $\mathbf{a} / \mathbf{a} \in \left\langle \left(1; 0; -\frac{\Delta\omega}{2\omega_R} \right) \right\rangle$.

Para $\lambda = i\Omega$, los autovectores $\mathbf{b} / \mathbf{b} \in \left\langle \left(i\frac{\Delta\omega}{\Omega_R}; 1; i\frac{2\omega_R}{\Omega_R} \right) \right\rangle$.

Para $\lambda = -i\Omega$, los autovectores $\mathbf{c} / \mathbf{c} \in \left\langle \left(-i\frac{\Delta\omega}{\Omega_R}; 1; -i\frac{2\omega_R}{\Omega_R} \right) \right\rangle$.

La solución particular es:

$$\mathbf{x}_p = c\vec{t}e \implies \mathbf{0} = \mathbb{A}\mathbf{x}_p + \mathbf{b} \implies \mathbf{x}_p = -\mathbb{A}^{-1}\mathbf{b}.$$

Una posible solución particular es $\mathbf{x}_p = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}^T$.

Juntando todo, considerando constantes $A, B, C \in \mathbb{R}$, la solución general queda:

$$\begin{bmatrix} R(t) \\ I(t) \\ n(t) \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{\Delta\omega}{2\omega_R} \end{bmatrix} + B \begin{bmatrix} i\frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \\ 1 \\ \frac{2\omega_R}{\Omega_R} \end{bmatrix} e^{i\Omega_R t} + C \begin{bmatrix} -i\frac{\Delta\omega}{\Omega_R} \\ 1 \\ -\frac{2\omega_R}{\Omega_R} \end{bmatrix} e^{-i\Omega_R t} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (\text{A.10.4})$$

Suponiendo la condición inicial $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, se determinan A, B, C :

$$I(0) = 0 = B + C \implies C = -B$$

$$\implies I(t) = 2iB \sin(\Omega_R t). \quad (\text{A.10.5})$$

$$R(0) = 0 = A + i\frac{\Delta\omega}{\Omega_R}(B - C) = A + 2i\frac{\Delta\omega}{\Omega_R}B \implies A = -2i\frac{\Delta\omega}{\Omega_R}$$

$$\implies R(t) = -2i\frac{\Delta\omega}{\Omega_R}B + 2i\frac{2\omega_R}{\Omega_R}B \cos(\Omega_R t) = -2i\frac{\Delta\omega}{\Omega_R}B [1 - \cos(\Omega_R t)], \quad (\text{A.10.6})$$

y también:

$$n(t) = 2i\frac{(\Delta\omega)^2}{2\omega_R\Omega_R}B + 2i\frac{2\omega_R}{\Omega_R}B \cos(\Omega_R t) + \frac{1}{2}, \quad (\text{A.10.7})$$

con lo cual:

$$n(0) = 0 = 2i\frac{(\Delta\omega)^2}{2\omega_R\Omega_R}B + 2i\frac{2\omega_R}{\Omega_R}B + \frac{1}{2} \implies -\frac{1}{2} = 2i\left(\frac{(\Delta\omega)^2}{2\omega_R\Omega_R} + \frac{2\omega_R}{\Omega_R}\right)B = 2i\frac{\Omega_R}{2\omega_R}B$$

$$\implies B = \frac{i}{4}\frac{2\omega_R}{\Omega_R}.$$

Con esto, finalmente:

$$R(t) = \frac{1}{2}\frac{2\omega_R\Delta\omega}{\Omega_R^2}[1 - \cos(\Omega_R t)] = \frac{2\omega_R\Delta\omega}{\Omega_R^2}\sin^2\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right), \quad (\text{A.10.8})$$

$$I(t) = -\frac{1}{2} \frac{2\omega_R}{\Omega_R} \sin(\Omega_R t), \quad (\text{A.10.9})$$

$$\begin{aligned}
n(t) &= -\frac{1}{2} \frac{(\Delta\omega)^2}{\Omega_R^2} - \frac{1}{2} \frac{(2\omega_R)^2}{\Omega_R^2} \cos(\Omega_R t) + \frac{1}{2} \\
&= \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{\Omega_R^2} [(\Delta\omega)^2 + (2\omega_R)^2 \cos(\Omega_R t)] \right\} \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \frac{(\Delta\omega)^2 + (2\omega_R)^2}{\Omega_R^2} - \frac{1}{\Omega_R^2} [(\Delta\omega)^2 + (2\omega_R)^2 \cos(\Omega_R t)] \right\} \\
&= \frac{1}{2} \frac{1}{\Omega_R^2} [(2\omega_R)^2 - (2\omega_R)^2 \cos(\Omega_R t)] \\
&= \frac{1}{2} \frac{(2\omega_R)^2}{\Omega_R^2} [1 - \cos(\Omega_R t)] \\
&= \frac{(2\omega_R)^2}{\Omega_R^2} \sin^2 \left(\frac{\Omega_R t}{2} \right).
\end{aligned} \quad (\text{A.10.10})$$

A.11. Transformada de Fourier de $V(z)$ en caso cuasi-1D

Partiéndose de Ec. (3.1.2), se plantea:

$$\begin{aligned}
\hat{V}_k &= \frac{1}{L} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-ikz} V(z) \\
&= \frac{1}{L} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\epsilon_0}{\epsilon} e^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-ikz} \frac{1}{\sqrt{z^2 + R^2}} \\
&= \frac{1}{L} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\epsilon_0}{\epsilon} e^2 \left(\int_{-\infty}^0 dz e^{-ikz} \frac{1}{\sqrt{z^2 + R^2}} + \int_0^{\infty} dz e^{-ikz} \frac{1}{\sqrt{z^2 + R^2}} \right) \\
&= \frac{1}{L} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\epsilon_0}{\epsilon} e^2 \left(- \int_{\infty}^0 dz' e^{-ik(-z')} \frac{1}{\sqrt{(z')^2 + R^2}} + \int_0^{\infty} dz e^{-ikz} \frac{1}{\sqrt{z^2 + R^2}} \right) \\
&= \frac{1}{L} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\epsilon_0}{\epsilon} e^2 \left(\int_0^{\infty} dz' e^{ikz'} \frac{1}{\sqrt{(z')^2 + R^2}} + \int_0^{\infty} dz e^{-ikz} \frac{1}{\sqrt{z^2 + R^2}} \right) \\
&= \frac{1}{L} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\epsilon_0}{\epsilon} e^2 \int_0^{\infty} dz (e^{ikz} + e^{-ikz}) \frac{1}{\sqrt{z^2 + R^2}} \\
&= \frac{2}{L} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\epsilon_0}{\epsilon} e^2 \int_0^{\infty} dz \frac{\cos(kz)}{\sqrt{z^2 + R^2}}.
\end{aligned} \quad (\text{A.11.1})$$

Se define

$$K_0(\omega) := \int_0^{\infty} dt \frac{\cos(\omega t)}{\sqrt{t^2 + 1}}, \quad (\text{A.11.2})$$

con $Re(\omega) > 0$, función modificada de Bessel de segunda especie de orden 0. Con esto:

$$\hat{V}_k = \frac{2}{L} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\epsilon_0}{\epsilon} e^2 K_0(R|k|). \quad (\text{A.11.3})$$

Referencias

- [1] Marlan O. Scully & Muhammad Suhail Zubairy, *Quantum Optics*, ed. Cambridge University Press, 2001, cap. 5.1.
- [2] John H. Davies, *The Physics of low-dimensional Semiconductors*, ed. Cambridge University Press, 1998, cap. 3.10.
- [3] Sutapa Ghosh & Gadi Eisenstein, *Combined time and frequency spectroscopy with engineered dual comb spectrometer*, 2022.
- [4] Samuel L. McCall & Erwin L. Hahn, *Self-Induced Transparency*, Physical Review 183, 1969, p. 457.
- [5] Hyatt M. Gibbs, *Spontaneous Decay of Coherently Excited Rb*, Physical Review Letters 29, 1972, p. 459.
- [6] Hyatt M. Gibbs, *Incoherent Resonance Fluorescence from a Rb Atomic Beam Excited by a Short Coherent Optical Pulse*, Physical Review A 8, 1973, p. 446.
- [7] Mark Fox, *Quantum Optics, an Introduction*, ed. Oxford University Press, 2006, cap. 9.5.3.
- [8] Hartmut Haug & Stephan W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, ed. World Scientific Publishing, 2004, cap. 7.1.
- [9] Claude Cohen-Tannoudji & Bernard Diu & Frank Laloë, *Quantum Mechanics*, Volume III, ed. WILEY-VCH, 2020, cap. XV.