Bài 6
Tương tác ánh sáng - vật chất

Huỳnh Thanh Đức

28/10/2023

Nội dung

8. Tương tác điện tử - ánh sáng trong chất rắn
   - Chất rắn trong trường điện từ biến đổi
   - Hamitonian tương tác điện tử - ánh sáng
   - Gauge vận tốc và gauge độ dài
   - Gần đúng nhiễu loạn phụ thuộc thời gian
   - Quy tắc vàng Fermi
   - Bức xạ cưỡng bức và bức xạ tự phát
   - Quy tắc lọc lựa
   - Biểu diễn lượng tử hóa lần thứ hai
   - Phương trình Bloch bán dẫn

Tài liệu tham khảo

- M. Kira and S. W. Koch, *Semiconductor Quantum Optics* (Cambridge University Press, 2012).
- H. Haug, S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (World Scientific, 2005).
- M. Lax, *Symmetry Principles in Solid State and Molecular Physics* (Dover, Mineola, 2001).

VIII. Tương tác điện tử - ánh sáng trong chất rắn

Chất rắn trong trường điện từ biến đổi

Khi có mặt trường điện từ mô tả bởi thế vector $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ và thế vô hướng $\phi(\mathbf{r}, t)$ Hamiltonian một hạt trong gần đúng điện tử độc lập có dạng

$$H_{1\mathrm{e}} = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) - e\phi \tag{1}$$

$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ và ta có khai triển $(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 = \mathbf{p}^2 + 2e\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} + \underbrace{e\cancel{(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A})}^{\,0}}_{\text{Coulomb gauge}} + e^2A^2$

$$H_{1\mathrm{e}} = H_{1\mathrm{e}}^0 + \frac{e}{m}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} + \frac{e^2A^2}{2m} - e\phi \tag{2}$$

trong đó

$$H_{1\mathrm{e}}^0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) \tag{3}$$

Hệ thức liên hệ giữa $\mathbf{A}$ và ϕ:

$$\mathbf{E} = -\boldsymbol{\nabla}\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \tag{4}$$

$\mathbf{A}$ và ϕ phụ thuộc gauge $\rightarrow$ cần chọn cách cố định chúng

Gauge vận tốc (Velocity gauge)

- Chọn gauge $\phi = 0$

  Hệ thức (4) dẫn đến $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\int_{-\infty}^{t} dt' \mathbf{E}(\mathbf{r}, t')$ (5)

  Hamiltonian (2) trở thành

$$H_{1\mathrm{e}}^{\mathrm{VG}} = H_{1\mathrm{e}}^{0} + \boxed{\frac{e}{m}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}} + \frac{e^2 A^2}{2m} \tag{6}$$

  Với toán tử vận tốc $\mathbf{v} = \frac{i}{\hbar}[H_{1\mathrm{e}}^{\mathrm{VG}}, \mathbf{r}] = \dfrac{\mathbf{p} + e\mathbf{A}}{m}$ Hamiltonian (6) cũng có thể viết như

$$H_{1\mathrm{e}}^{\mathrm{VG}} = H_{1\mathrm{e}}^{0} + \boxed{e\mathbf{A}\cdot\mathbf{v}} - \frac{e^2 A^2}{2m} \tag{7}$$

  Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian trong gauge vận tốc:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi^{\mathrm{VG}}(t)\right\rangle = H_{1\mathrm{e}}^{\mathrm{VG}}\left|\psi^{\mathrm{VG}}(t)\right\rangle \tag{8}$$

Gauge độ dài (Length gauge)

- Chọn gauge $\mathbf{A} = 0$

  Hệ thức (4) dẫn đến $$\phi(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{r} \tag{9}$$

  và Hamiltonian (2) trở thành

  $$H_{1e}^{\mathrm{LG}} = H_{1e}^{0} + \boxed{e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}} \tag{10}$$

  Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian trong gauge độ dài:

  $$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left|\psi^{\mathrm{LG}}(t)\right\rangle = H_{1e}^{\mathrm{LG}} \left|\psi^{\mathrm{LG}}(t)\right\rangle \tag{11}$$

- Phép biến đổi unita giữa LG và VG:

  $$\left|\psi^{\mathrm{VG}}(t)\right\rangle = Q(\mathbf{r}, t) \left|\psi^{\mathrm{LG}}(t)\right\rangle \ , \quad \left|\psi^{\mathrm{LG}}(t)\right\rangle = Q^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \left|\psi^{\mathrm{VG}}(t)\right\rangle \tag{12}$$

  trong đó $$Q(\mathbf{r}, t) = \exp\left[-\frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{r}\right] \tag{13}$$

Gần đúng nhiễu loạn phụ thuộc thời gian

Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian mô tả tương tác điện tử - ánh sáng có dạng

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{\nu\mathbf{k}}(t)\rangle = \left(H^0_{1\mathrm{e}}(\mathbf{r}) + H^{e-L}_{1\mathrm{e}}(t)\right)|\psi_{\nu\mathbf{k}}(t)\rangle \tag{14}$$

trong đó $H^{e-L}_{1\mathrm{e}}(t) = \frac{e}{m}\mathbf{A}(t)\cdot\mathbf{p}$ trong VG và $H^{e-L}_{1\mathrm{e}}(t) = e\mathbf{E}(t)\cdot\mathbf{r}$ trong LG. Nếu $H^{e-L}_{1\mathrm{e}}$ nhỏ, phương trình (14) có thể giải bằng lý thuyết nhiễu loạn phụ thuộc thời gian.

Hàm sóng tính đến bậc 1 nhiễu loạn là

$$|\psi_{\nu\mathbf{k}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_\nu(\mathbf{k})t}|\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle + \sum_\mu c^{(1)}_{\nu\mu}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_\mu(\mathbf{k})t}|\psi_{\mu\mathbf{k}}\rangle \tag{15}$$

trong đó

$$c^{(1)}_{\nu\mu}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\langle\psi_{\mu\mathbf{k}}|H^{e-L}_{1\mathrm{e}}(t')|\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_\nu(\mathbf{k})-\varepsilon_\mu(\mathbf{k}))t'} \tag{16}$$

$|\psi_{\mu\mathbf{k}}\rangle$ và $\varepsilon_\mu(\mathbf{k})$ là hàm riêng và trị riêng của phương trình Schrödinger dừng

$$H^0_{1\mathrm{e}}|\psi_{\mu\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_\mu(\mathbf{k})|\psi_{\mu\mathbf{k}}\rangle \tag{17}$$

Gần đúng nhiễu loạn phụ thuộc thời gian

Xét tương tác điện tử - ánh sáng dưới dạng gauge vận tốc

$$H^{e-L}(t) = \frac{e}{m}\mathbf{A}(t)\cdot\mathbf{p} \quad \text{trong đó} \quad \mathbf{A}(t) = A_0\hat{\mathbf{e}}\; e^{\pm i\omega t}.$$

Thay vào (16) ta nhận được

$$c_{\nu\mu}^{(1)}(t) = \frac{e}{\hbar m}A_0\hat{\mathbf{e}}\cdot\mathbf{p}_{\mu\nu}(\mathbf{k})\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_\nu(\mathbf{k})-\varepsilon_\mu(\mathbf{k})\mp\hbar\omega)t}-1}{(\varepsilon_\nu(\mathbf{k})-\varepsilon_\mu(\mathbf{k})\mp\hbar\omega)/\hbar},$$

trong đó

$$\mathbf{p}_{\mu\nu}(\mathbf{k}) = \langle\psi_{\mu\mathbf{k}}|\mathbf{p}|\psi_{\nu\mathbf{k}}\rangle = \int\frac{d^3r}{V}u_{\mu\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{p}\; e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

Quy tắc vàng Fermi

Xác suất điện tử chuyển từ trạng thái $|\psi_{v\mathbf{k}}\rangle$ sang $|\psi_{c\mathbf{k}}\rangle$ là

$$\begin{aligned} P_{vc}(t) &\propto |\langle\psi_{c\mathbf{k}}|\psi_{v\mathbf{k}}(t)\rangle|^2 = \left|c_{vc}^{(1)}(t)\right|^2 \\ &\propto \frac{e^2}{\hbar^2 m^2}\,|A_0\hat{\mathbf{e}}\cdot\mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k})|^2 \left[\frac{\sin[(\varepsilon_c(\mathbf{k})-\varepsilon_v(\mathbf{k})\pm\hbar\omega)t/2\hbar]}{(\varepsilon_c(\mathbf{k})-\varepsilon_v(\mathbf{k})\pm\hbar\omega)/2\hbar}\right]^2 \end{aligned} \tag{18}$$

Định nghĩa tốc độ chuyển dời

$$R_{vc} = \lim_{t\to\infty}\frac{P_{vc}(t)}{t} \tag{19}$$

ta nhận được

$$R_{vc}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi e^2}{\hbar m^2}\,|A_0\hat{\mathbf{e}}\cdot\mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k})|^2\,\delta\left(\varepsilon_c(\mathbf{k})-\varepsilon_v(\mathbf{k})\pm\hbar\omega\right) \tag{20}$$

Tốc độ chuyển dời toàn phần giữa dải hóa trị v và dải dẫn c:

$$\mathcal{R}_{vc} = \frac{2\pi e^2}{\hbar m^2}\sum_{\mathbf{k}}|A_0\hat{\mathbf{e}}\cdot\mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k})|^2\,\delta\left(\varepsilon_c(\mathbf{k})-\varepsilon_v(\mathbf{k})\pm\hbar\omega\right) \tag{21}$$

tổng tất cả các trạng thái điện tử

Quy tắc vàng Fermi

- Tốc độ hấp thụ:

$$R_{\mathrm{ab}}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi e^2 A_0^2}{\hbar m^2} \left|\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k})\right|^2 \delta\left(\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega\right) \tag{22}$$

- Tốc độ bức xạ:

$$R_{\mathrm{emit}}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi e^2 A_0^2}{\hbar m^2} \left|\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k})\right|^2 \delta\left(\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{k}) + \hbar\omega\right) \tag{23}$$

Bức xạ mô tả bởi (23) được gọi là bức xạ cảm ứng. Còn một loại bức xạ khác là bức xạ tự phát. Tuy nhiên, để mô tả được nó ta phải biểu diễn trường điện từ dưới dạng lượng tử.

Bức xạ cảm ứng và bức xạ tự phát

Đưa vào các toán tử sinh, hủy photon $b^\dagger$, b

$$b^\dagger|n_{\rm ph}\rangle = \sqrt{n_{\rm ph}+1}|n_{\rm ph}+1\rangle \ , \quad b|n_{\rm ph}\rangle = \sqrt{n_{\rm ph}}|n_{\rm ph}-1\rangle$$

trường ánh sáng được lượng tử hóa như

$$A_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega\epsilon}}(b^\dagger + b)$$

Các yếu tố ma trận tương tác điện tử - ánh sáng khác không là:

$$\langle n_{\rm ph} \pm 1, u_{c\mathbf{k}}|A_0 \hat{\mathbf{e}}\cdot\mathbf{p}|u_{v\mathbf{k}}, n_{\rm ph}\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega\epsilon}}\langle n_{\rm ph}\pm 1, u_{c\mathbf{k}}|(b^\dagger + b)\hat{\mathbf{e}}\cdot\mathbf{p}|u_{v\mathbf{k}}, n_{\rm ph}\rangle$$
$$= \begin{cases} \sqrt{\frac{\hbar n_{\rm ph}}{2\omega\epsilon}}\hat{\mathbf{e}}\cdot\langle u_{c\mathbf{k}}|\mathbf{p}|u_{v\mathbf{k}}\rangle & \text{dấu}(-) \\ \sqrt{\frac{\hbar (n_{\rm ph}+1)}{2\omega\epsilon}}\hat{\mathbf{e}}\cdot\langle u_{c\mathbf{k}}|\mathbf{p}|u_{v\mathbf{k}}\rangle & \text{dấu}(+) \end{cases}$$

Bức xạ cảm ứng và bức xạ tự phát

Quy tắc vàng Fermi trong trường hợp ánh sáng được lượng tử hóa là

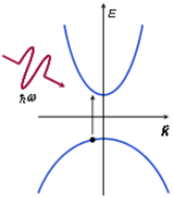
- Tốc độ hấp thụ:

$$R_{\mathrm{ab}}(\mathbf{k}) = \frac{\pi e^2 n_{\mathrm{ph}}}{m^2 \omega \epsilon} \left|\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k})\right|^2 \delta\left(\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega\right) \tag{24}$$

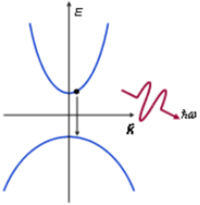
- Tốc độ bức xạ:

$$\begin{aligned} R_{\mathrm{emit}}(\mathbf{k}) &= R_{\mathrm{stim}}(\mathbf{k}) + R_{\mathrm{spon}}(\mathbf{k}) \\ R_{\mathrm{stim}}(\mathbf{k}) &= \frac{\pi e^2 n_{\mathrm{ph}}}{m^2 \omega \epsilon} \left|\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k})\right|^2 \delta(\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{k}) + \hbar\omega) \\ R_{\mathrm{spon}}(\mathbf{k}) &= \frac{\pi e^2}{m^2 \omega \epsilon} \left|\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k})\right|^2 \delta(\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{k}) + \hbar\omega) \end{aligned} \tag{25}$$

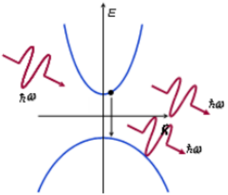
Bức xạ cảm ứng và bức xạ tự phát



Hấp thụ



Bức xạ tự phát



Bức xạ cảm ứng

- Tái hợp điện tử - lỗ trống không cần có mặt các photon.
- Thời gian tái hợp: $\tau_{\text{spon}} \sim 1\text{ns}$.
- Tốc độ bức xạ: $R_{\text{spon}} = \tau_{\text{spon}}^{-1}$.
- Ví dụ: đèn LED.

- Tái hợp điện tử - lỗ trống cần có mặt các photon.
- Photon bức xạ và photon kích thích là kết hợp.
- Tốc độ bức xạ: $R_{\text{stim}} = n_{\text{ph}} R_{\text{spon}}$.
- Ví dụ: đèn LASER.

Quy tắc lọc lựa

Tùy thuộc yếu tố ma trận xung lượng $\mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k}) = \langle\psi_{c\mathbf{k}}|\mathbf{p}|\psi_{v\mathbf{k}}\rangle$ khác không hay bằng không mà ta có chuyển mức được phép hay bị cấm.
Cụ thể, sử dụng lý thuyết k.p ta có thể tính các yếu tố ma trận xung lượng (cho các bán dẫn cấu trúc diamond, zinc blende) tại $\mathbf{k} = 0$ như sau

- Các trạng thái điện tử dẫn:

$$|u^0_{\mathrm{c1}}\rangle = \left|\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\right\rangle = \begin{bmatrix} |S\rangle \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |u^0_{\mathrm{c2}}\rangle = \left|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ |S\rangle \end{bmatrix}$$

- Các trạng thái điện tử hóa trị:

$$|u^0_{\mathrm{hh1}}\rangle = \left|\tfrac{3}{2}, +\tfrac{3}{2}\right\rangle = -\tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} |X\rangle + i|Y\rangle \\ 0 \end{bmatrix}, \; |u^0_{\mathrm{hh2}}\rangle = \left|\tfrac{3}{2}, -\tfrac{3}{2}\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ |X\rangle - i|Y\rangle \end{bmatrix}$$

$$|u^0_{\mathrm{lh1}}\rangle = \left|\tfrac{3}{2}, +\tfrac{1}{2}\right\rangle = -\tfrac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -2|Z\rangle \\ |X\rangle + i|Y\rangle \end{bmatrix}, \; |u^0_{\mathrm{lh2}}\rangle = \left|\tfrac{3}{2}, -\tfrac{1}{2}\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} |X\rangle + i|Y\rangle \\ 2|Z\rangle \end{bmatrix}$$

- Các yếu tố ma trận cơ bản:

$$\langle S|p_x|X\rangle = \langle S|p_y|Y\rangle = \langle S|p_z|Z\rangle = \frac{m}{\hbar}P$$

Quy tắc lọc lựa

- Các yếu tố ma trận xung lượng giữa dải dẫn và dải lỗ trống nặng:

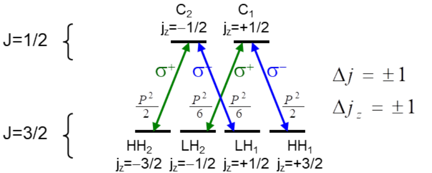
$$\langle u^0_{\mathrm{c1}}|\mathbf{p}|u^0_{\mathrm{hh1}}\rangle = -\frac{m}{\hbar}\frac{P}{\sqrt{2}}(\hat{x}+i\hat{y}), \quad \langle u^0_{\mathrm{c2}}|\mathbf{p}|u^0_{\mathrm{hh1}}\rangle = 0,$$

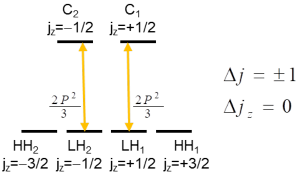
$$\langle u^0_{\mathrm{c1}}|\mathbf{p}|u^0_{\mathrm{hh2}}\rangle = 0, \quad \langle u^0_{\mathrm{c2}}|\mathbf{p}|u^0_{\mathrm{hh2}}\rangle = \frac{m}{\hbar}\frac{P}{\sqrt{2}}(\hat{x}-i\hat{y}).$$

- Các yếu tố ma trận xung lượng giữa dải dẫn và dải lỗ trống nhẹ:

$$\langle u^0_{\mathrm{c1}}|\mathbf{p}|u^0_{\mathrm{lh1}}\rangle = \frac{m}{\hbar}\sqrt{\frac{2}{3}}P\hat{z}, \quad \langle u^0_{\mathrm{c2}}|\mathbf{p}|u^0_{\mathrm{lh1}}\rangle = -\frac{m}{\hbar}\frac{P}{\sqrt{6}}(\hat{x}+i\hat{y}),$$

$$\langle u^0_{\mathrm{c1}}|\mathbf{p}|u^0_{\mathrm{lh2}}\rangle = \frac{m}{\hbar}\frac{P}{\sqrt{6}}(\hat{x}-i\hat{y}), \quad \langle u^0_{\mathrm{c2}}|\mathbf{p}|u^0_{\mathrm{lh2}}\rangle = \frac{m}{\hbar}\sqrt{\frac{2}{3}}P\hat{z}.$$





Hamiltonian lượng tử hóa lần thứ hai

Hamiltonian hệ điện tử trong tinh thể tương tác với ánh sáng là

$$H = \sum_i H_{1\mathrm{e}}(\mathbf{r}_i, t) = \sum_i H^0_{1\mathrm{e}}(\mathbf{r}_i) + \sum_i H^{e-L}_{1\mathrm{e}}(\mathbf{r}_i, t). \tag{26}$$

Hamiltonian lượng tử hóa lần thứ 2 trong hệ cơ sở trực chuẩn $\{|\psi_{\lambda\mathbf{k}}\rangle\}$,

$$\langle\psi_{\lambda\mathbf{k}}|\psi_{\lambda'\mathbf{k}'}\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\ , \tag{27}$$

có dạng

$$\begin{aligned}
H &= H^0 + H^{e-L}\ , \\
H^0 &= \sum_{\lambda\lambda'\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle\psi_{\lambda\mathbf{k}}|H^0_{1\mathrm{e}}(\mathbf{r})|\psi_{\lambda'\mathbf{k}'}\rangle a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}'}\ , \\
H^{e-L} &= \sum_{\lambda\lambda'\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle\psi_{\lambda\mathbf{k}}|H^{e-L}_{1\mathrm{e}}(\mathbf{r}, t)|\psi_{\lambda'\mathbf{k}'}\rangle a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}'}\ ,
\end{aligned} \tag{28}$$

trong đó các toán tử sinh, hủy điện tử tuân theo các hệ thức phản giao hoán:

$$\{a_{\lambda\mathbf{k}}, a_{\lambda'\mathbf{k}'}\} = \{a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}, a^\dagger_{\lambda'\mathbf{k}'}\} = 0, \quad \{a_{\lambda\mathbf{k}}, a^\dagger_{\lambda'\mathbf{k}'}\} = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \tag{29}$$

Hamiltonian tương tác điện tử - ánh sáng trong VG

Nếu chọn hệ cơ sở là hàm riêng của $H^0_{1\mathrm{e}}$ thì H^0 trở thành

$$H^0 = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda\mathbf{k}}. \tag{30}$$

Lưu ý: các hàm riêng của $H^0_{1\mathrm{e}}$ không đảm bảo điều kiện trực chuẩn (27) một cách chính xác mà chỉ gần đúng khi k và k' nhỏ (gần đúng sóng dài), xem PT. (45) trong Bài 1.

Trong gauge vận tốc, yếu tố ma trận tương tác điện tử - ánh sáng là

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{\lambda\mathbf{k}}|H^{e-L}_{1\mathrm{e}}(\mathbf{r},t)|\psi_{\lambda'\mathbf{k}'}\rangle &= \langle\psi_{\lambda\mathbf{k}}|\frac{e}{m}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{p}|\psi_{\lambda'\mathbf{k}'}\rangle + \frac{e^2A^2}{2m}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \\
&\simeq \frac{e}{m}\mathbf{A}(t)\cdot\langle\psi_{\lambda\mathbf{k}}|\mathbf{p}|\psi_{\lambda'\mathbf{k}'}\rangle + \frac{e^2A^2}{2m}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\ ,
\end{aligned}$$

trong đó

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{\lambda\mathbf{k}}|\mathbf{p}|\psi_{\lambda'\mathbf{k}'}\rangle &= \int \frac{d^3r}{V} u^*_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\ \mathbf{p}\ e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} u_{\lambda'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\
&= \frac{1}{N}\sum_i^N e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} \int_{V_{\mathrm{cell}}} \frac{d^3r}{V_{\mathrm{cell}}} u^*_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{p} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} u_{\lambda'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}).
\end{aligned}$$

Hamiltonian tương tác điện tử - ánh sáng trong VG

Sử dụng hệ thức $\sum_{i}^{N} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} = N\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ ta thu được

$$\langle \psi_{\lambda\mathbf{k}}|\mathbf{p}|\psi_{\lambda'\mathbf{k}'}\rangle = \mathbf{p}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \ , \tag{31}$$

trong đó

$$\mathbf{p}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) = \int_{V_{\text{cell}}} \frac{d^3r}{V_{\text{cell}}} u^*_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{p} \ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\lambda'\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv \langle u_{\lambda\mathbf{k}}|\mathbf{p}(\mathbf{k})|u_{\lambda'\mathbf{k}}\rangle, \tag{32}$$

với

$$\mathbf{p}(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{p} \ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{33}$$

Biểu diễn Hamiltonian đơn hạt trong không gian k

$$H^0_{1\text{e}}(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H^0_{1\text{e}} \ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{34}$$

và sử dụng hệ thức

$$[H^0_{1\text{e}}, \mathbf{r}] = -\frac{i\hbar}{m}\mathbf{p} \ , \tag{35}$$

ta nhận được

$$\mathbf{p}(\mathbf{k}) = \frac{m}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} H^0_{1\text{e}}(\mathbf{k}). \tag{36}$$

Hamiltonian tương tác điện tử - ánh sáng trong VG

Như vậy, các yếu tố ma trận xung lượng (32) có thể tính qua công thức

$$\mathbf{p}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) = \frac{m}{\hbar}\langle u_{\lambda\mathbf{k}}|\nabla_{\mathbf{k}}H^0_{1\mathrm{e}}(\mathbf{k})|u_{\lambda'\mathbf{k}}\rangle. \tag{37}$$

Hamiltonian lượng tử hóa lần thứ hai cho tương tác điện tử - ánh sáng trong gauge vận tốc có dạng

$$H^{e-L} = \frac{e}{m}\mathbf{A}(t)\cdot\sum_{\lambda\lambda'\mathbf{k}}\mathbf{p}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k})a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}} + \frac{e^2A^2}{2m}\sum_{\lambda\mathbf{k}}a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda\mathbf{k}}\ . \tag{38}$$

Hamiltonian tương tác điện tử - ánh sáng trong LG

Trong gauge độ dài, yếu tố ma trận tương tác điện tử - ánh sáng là

$$\langle \psi_{\lambda\mathbf{k}} | H_{1\mathrm{e}}^{e-L}(\mathbf{r},t) | \psi_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle = \langle \psi_{\lambda\mathbf{k}} | e\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{r} | \psi_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle \simeq e\mathbf{E}(t)\cdot\langle \psi_{\lambda\mathbf{k}} | \mathbf{r} | \psi_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle, \quad (39)$$

trong đó yếu tố ma trận vị trí được cho bởi

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{\lambda\mathbf{k}} | \mathbf{r} | \psi_{\lambda'\mathbf{k}'} \rangle &= \int \frac{d^3r}{V}\; u^*_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\;\mathbf{r}\; e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} u_{\lambda'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\
&= i\nabla_{\mathbf{k}} \left(\int \frac{d^3r}{V}\; u^*_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} u_{\lambda'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \right) \\
&\quad - i \int \frac{d^3r}{V}\; \left(\nabla_{\mathbf{k}} u^*_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} u_{\lambda'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\
&= i\nabla_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{N} \sum_i^N e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} \int_{V_{\mathrm{cell}}} \frac{d^3r}{V_{\mathrm{cell}}} u^*_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{\lambda'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \right) \\
&\quad - i \frac{1}{N} \sum_i^N e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} \int_{V_{\mathrm{cell}}} \frac{d^3r}{V_{\mathrm{cell}}} \left(\nabla_{\mathbf{k}} u^*_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{\lambda'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}).
\end{aligned}$$

Hamiltonian tương tác điện tử - ánh sáng trong LG

Sử dụng hệ thức $\sum_i^N e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} = N\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ và gần đúng sóng dài, $k, k' \ll \dfrac{2\pi}{a}$, ta được

$$\begin{aligned} \langle\psi_{\lambda\mathbf{k}}|\mathbf{r}|\psi_{\lambda'\mathbf{k}'}\rangle &\simeq i\nabla_{\mathbf{k}}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\int_{V_{\text{cell}}}\frac{d^3r}{V_{\text{cell}}}u^*_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r})u_{\lambda'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\ &\quad -i\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\int_{V_{\text{cell}}}\frac{d^3r}{V_{\text{cell}}}\left(\nabla_{\mathbf{k}}u^*_{\lambda\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right)u_{\lambda'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\ &= i\nabla_{\mathbf{k}}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} - i\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\langle\nabla_{\mathbf{k}}u_{\lambda\mathbf{k}}|u_{\lambda'\mathbf{k}'}\rangle. \end{aligned} \tag{40}$$

Định nghĩa yếu tố ma trận lưỡng cực

$$\boldsymbol{\xi}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) = -i\langle\nabla_{\mathbf{k}}u_{\lambda\mathbf{k}}|u_{\lambda'\mathbf{k}}\rangle, \tag{41}$$

Các yếu tố ma trận vị trí (40) được viết lại dưới dạng

$$\langle\psi_{\lambda\mathbf{k}}|\mathbf{r}|\psi_{\lambda'\mathbf{k}'}\rangle = \left(\boldsymbol{\xi}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) + i\delta_{\lambda\lambda'}\nabla_{\mathbf{k}}\right)\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \tag{42}$$

Hamiltonian tương tác điện tử - ánh sáng trong LG

Trường hợp $\lambda = \lambda'$, $\boldsymbol{\xi}_{\lambda\lambda}(\mathbf{k})$ là thế Berry.

Trường hợp $\lambda \neq \lambda'$, từ hệ thức (35) cùng với (31) và (42) người ta rút ra:

$$\boldsymbol{\xi}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) = -\frac{i\hbar}{m}\frac{\mathbf{p}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k})}{\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k})}. \tag{43}$$

Hamiltonian lượng tử hóa lần thứ hai cho tương tác điện tử - ánh sáng trong gauge độ dài là

$$H^{e-L} = e\mathbf{E}(t)\cdot\sum_{\lambda\lambda'\mathbf{k}}\boldsymbol{\xi}_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k})a^{\dagger}_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}} + ie\mathbf{E}(t)\cdot\sum_{\lambda\mathbf{k}\mathbf{k}'}\nabla_{\mathbf{k}}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}a^{\dagger}_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda\mathbf{k}'}. \tag{44}$$

Phương trình chuyển động

Phương trình chuyển động Heisenberg (Heisenberg picture) cho toán tử $a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}}$:

$$\frac{d}{dt}a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}} = \frac{i}{\hbar}[H^0 + H^{e-L}, a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}}] \tag{45}$$

- Giao hoán tử của $a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}}$ với H^0 (30):

$$\begin{aligned}
[H^0, a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}}] &= \sum_{\nu\mathbf{k}'}\varepsilon_\nu(\mathbf{k}')\left(a^\dagger_{\nu\mathbf{k}'}a_{\nu\mathbf{k}'}a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}} - a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}}a^\dagger_{\nu\mathbf{k}'}a_{\nu\mathbf{k}'}\right) \\
&= \sum_{\nu\mathbf{k}'}\varepsilon_\nu(\mathbf{k}')\left[\left(a^\dagger_{\nu\mathbf{k}'}a_{\lambda'\mathbf{k}}\delta_{\nu\lambda}\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} - \cancel{a^\dagger_{\nu\mathbf{k}'}a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\nu\mathbf{k}'}a_{\lambda'\mathbf{k}}}\right)\right. \\
&\qquad\qquad \left. - \left(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}}\delta_{\lambda'\nu}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - \cancel{a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a^\dagger_{\nu\mathbf{k}'}a_{\lambda'\mathbf{k}}a_{\nu\mathbf{k}'}}\right)\right] \\
&= (\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k}))a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}}
\end{aligned}$$

Phương trình chuyển động

- Giao hoán tử của $a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}}$ với H^{e-L} trong gauge vận tốc, PT. (38):

$$
\begin{aligned}
[H^{e-L}, a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}}] &= \frac{e}{m}\mathbf{A}(t)\cdot\sum_{\mu\nu\mathbf{k}'}\mathbf{p}_{\mu\nu}(\mathbf{k}')\left(a^\dagger_{\mu\mathbf{k}'}a_{\nu\mathbf{k}'}a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}} - a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}}a^\dagger_{\mu\mathbf{k}'}a_{\nu\mathbf{k}'}\right)\\
&= \frac{e}{m}\mathbf{A}(t)\cdot\sum_{\mu\nu\mathbf{k}'}\mathbf{p}_{\mu\nu}(\mathbf{k}')\Big[\left(a^\dagger_{\mu\mathbf{k}'}a_{\lambda'\mathbf{k}}\delta_{\nu\lambda}\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} - \cancel{a^\dagger_{\mu\mathbf{k}'}a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\nu\mathbf{k}'}a_{\lambda'\mathbf{k}}}\right)\\
&\qquad - \left(a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\nu\mathbf{k}'}\delta_{\lambda'\mu}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - \cancel{a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a^\dagger_{\mu\mathbf{k}'}a_{\lambda'\mathbf{k}}a_{\nu\mathbf{k}'}}\right)\Big]\\
&= \frac{e}{m}\mathbf{A}(t)\cdot\sum_{\mu}\left(\mathbf{p}_{\mu\lambda}(\mathbf{k})a^\dagger_{\mu\mathbf{k}}a_{\lambda'\mathbf{k}} - \mathbf{p}_{\lambda'\mu}(\mathbf{k})a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}a_{\mu\mathbf{k}}\right).
\end{aligned}
$$

Lưu ý rằng số hạng thứ 2 trong PT. (38) giao hoán với $a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}}$.

Phương trình chuyển động

- Giao hoán tử của $a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}}$ với H^{e-L} trong gauge độ dài, PT. (44):

$$[H^{e-L}, a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}}] = e\mathbf{E}(t) \cdot \sum_{\mu\nu\mathbf{k}'} \boldsymbol{\xi}_{\mu\nu}(\mathbf{k}') \left(a^\dagger_{\mu\mathbf{k}'} a_{\nu\mathbf{k}'} a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}} - a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}} a^\dagger_{\mu\mathbf{k}'} a_{\nu\mathbf{k}'} \right)$$
$$+ ie\mathbf{E}(t) \cdot \sum_{\nu\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \nabla_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}''} \left(a^\dagger_{\nu\mathbf{k}'} a_{\nu\mathbf{k}''} a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}} - a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}} a^\dagger_{\nu\mathbf{k}'} a_{\nu\mathbf{k}''} \right)$$

Chú ý rằng

$$\nabla_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}''} = -\nabla_{\mathbf{k}''} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}''}$$
$$\sum_{\mathbf{k}'} (\nabla_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}) a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}'} a_{\lambda'\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}'} a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}'} a_{\lambda\mathbf{k}} = -(\nabla_{\mathbf{k}} a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}}) a_{\lambda'\mathbf{k}}$$
$$\sum_{\mathbf{k}'} (\nabla_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}) a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}'} = -\sum_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \nabla_{\mathbf{k}'} a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}'} = -a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} (\nabla_{\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}})$$

ta được

$$[H^{e-L}, a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}}] = e\mathbf{E}(t) \cdot \sum_{\mu} \left(\boldsymbol{\xi}_{\mu\lambda}(\mathbf{k}) a^\dagger_{\mu\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}} - \boldsymbol{\xi}_{\lambda'\mu}(\mathbf{k}) a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\mu\mathbf{k}} \right)$$
$$- ie\mathbf{E}(t) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} (a^\dagger_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}})$$

Phương trình Bloch bán dẫn

Định nghĩa đại lượng ma trận mật độ rút gọn

$$\rho_{\lambda'\lambda}(\mathbf{k}) = \langle a^{\dagger}_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda'\mathbf{k}} \rangle \tag{46}$$

Từ phương trình chuyển động Heisenberg ta nhận được phương trình Bloch bán dẫn cho ma trận mật độ rút gọn trong VG:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) = &-\frac{i}{\hbar}\left(\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k})\right)\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \\ &- \frac{ie}{\hbar m}\mathbf{A}(t)\cdot\sum_{\mu}\left(\mathbf{p}_{\lambda\mu}(\mathbf{k})\rho_{\mu\lambda'}(\mathbf{k}) - \rho_{\lambda\mu}(\mathbf{k})\mathbf{p}_{\mu\lambda'}(\mathbf{k})\right) \end{aligned}} \tag{47}$$

và phương trình Bloch bán dẫn cho ma trận mật độ rút gọn trong LG:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) = &-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k}))\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \\ &- \frac{ie}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\sum_{\mu}\left(\boldsymbol{\xi}_{\lambda\mu}(\mathbf{k})\rho_{\mu\lambda'}(\mathbf{k}) - \rho_{\lambda\mu}(\mathbf{k})\boldsymbol{\xi}_{\mu\lambda'}(\mathbf{k})\right) \\ &+ \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\nabla_{\mathbf{k}}\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \end{aligned}} \tag{48}$$

Phương trình Bloch bán dẫn

Áp dụng cho mô hình bán dẫn hai dải (bao gồm dải dẫn và dải hóa trị), ta nhận được các phương trình (trong LG)

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}p_{\mathbf{k}} &= -\frac{i}{\hbar}\left(\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{k})\right)p_{\mathbf{k}} + \frac{ie}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\boldsymbol{\xi}_{cv}(\mathbf{k})\left(n_{c\mathbf{k}} - n_{v\mathbf{k}}\right) \\
&\quad + \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\nabla_{\mathbf{k}}p_{\mathbf{k}} \\
\frac{d}{dt}n_{c\mathbf{k}} &= 2\ \mathrm{Im}\left[\frac{e}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\boldsymbol{\xi}_{cv}(\mathbf{k})p^*_{\mathbf{k}}\right] + \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\nabla_{\mathbf{k}}n_{c\mathbf{k}} \\
\frac{d}{dt}n_{v\mathbf{k}} &= -2\ \mathrm{Im}\left[\frac{e}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\boldsymbol{\xi}_{cv}(\mathbf{k})p^*_{\mathbf{k}}\right] + \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\nabla_{\mathbf{k}}n_{v\mathbf{k}}
\end{aligned}
\tag{49}
$$

trong đó

$$
\begin{aligned}
p_{\mathbf{k}} &= \rho_{cv}(\mathbf{k}) = \langle a^\dagger_{v\mathbf{k}}a_{c\mathbf{k}}\rangle \quad \text{độ phân cực vi mô} \\
n_{c\mathbf{k}} &= \rho_{cc}(\mathbf{k}) = \langle a^\dagger_{c\mathbf{k}}a_{c\mathbf{k}}\rangle \quad \text{phân bố điện tử dẫn} \\
n_{v\mathbf{k}} &= \rho_{vv}(\mathbf{k}) = \langle a^\dagger_{v\mathbf{k}}a_{v\mathbf{k}}\rangle \quad \text{phân bố điện tử hóa trị}
\end{aligned}
$$

Phương trình Bloch bán dẫn

Nếu sử dụng hình thức luận điện tử - lỗ trống các phương trình (49) trở thành

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}p_{\mathbf{k}} &= -\frac{i}{\hbar}\left(E_g + \varepsilon^e_{\mathbf{k}} + \varepsilon^h_{\mathbf{k}}\right)p_{\mathbf{k}} + \frac{ie}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\boldsymbol{\xi}_{cv}(\mathbf{k})\left(n^e_{\mathbf{k}} + n^h_{\mathbf{k}} - 1\right) \\
&\quad + \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\nabla_{\mathbf{k}}p_{\mathbf{k}} \\
\frac{d}{dt}n^\mu_{\mathbf{k}} &= 2\,\mathrm{Im}\left[\frac{e}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\boldsymbol{\xi}_{cv}(\mathbf{k})p^*_{\mathbf{k}}\right] + \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}(t)\cdot\nabla_{\mathbf{k}}n^\mu_{\mathbf{k}} \quad \text{với} \quad \mu = e, h
\end{aligned} \tag{50}
$$

trong đó $p_{\mathbf{k}} = \rho_{cv}(\mathbf{k})$ là độ phân cực vi mô, $n^e_{\mathbf{k}} = \rho_{cc}(\mathbf{k})$ là phân bố điện tử và $n^h_{\mathbf{k}} = 1 - \rho_{vv}(\mathbf{k})$ là phân bố lỗ trống.

Năng lượng điện tử, lỗ trống và khe dải được cho bởi:

$$
\begin{aligned}
\varepsilon^e_{\mathbf{k}} &= \varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_c(0) \\
\varepsilon^h_{\mathbf{k}} &= -\varepsilon_v(\mathbf{k}) + \varepsilon_v(0) \\
E_g &= \varepsilon_c(0) - \varepsilon_v(0)
\end{aligned}
$$

Ví dụ minh họa

Xét mô hình hệ bán dẫn 1 chiều gồm 1 dải dẫn và 1 dải hóa trị với tán sắc năng lượng parabolic

$$\varepsilon_c(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} + E_g \;, \quad \varepsilon_v(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}$$

với $m_c = 0.067\ m$, $m_v = -0.46\ m$, $E_g = 1.5\ \mathrm{eV}$.

Yếu tố ma trận lưỡng cực $\xi_{cv} = \xi_{vc} = 0.3\ \mathrm{nm}$.

Điện trường của ánh sáng có dạng xung gauss:

$$E(t) = E_{\max} e^{-\left(\frac{t}{\tau_L}\right)^2} \cos(\omega_L t)$$

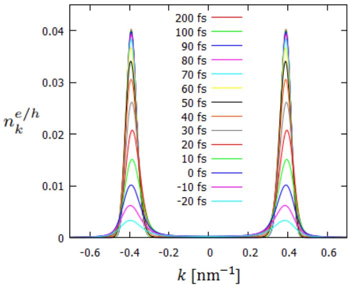
Chọn $k_{\mathrm{cutoff}} = 3\ \mathrm{nm}^{-1}$ ($k_{\mathrm{cutoff}} \geq |k|$) và rời rạc hóa không gian k bằng cách chia đều thành 1000 điểm.
Giải phương trình Bloch bán dẫn (49) bằng phương pháp Runge-Kutta bậc 4 với bước thời gian là $0.02\ \mathrm{fs}$.

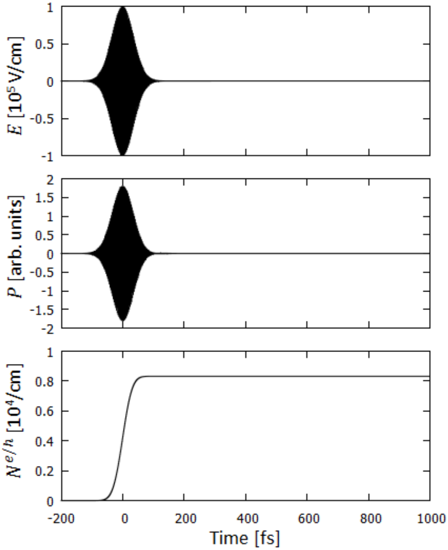
Ví dụ minh họa

Sử dụng $E_{\max} = 10^5 \mathrm{V/cm}$, $\tau_L = 50$ fs, $\hbar\omega_L = 1.6$ eV

$$P = \frac{1}{L}\sum_k (\xi_{vc} p_k + \xi_{cv} p_k^*)$$
$$= \frac{1}{2\pi}\int dk\ (\xi_{vc} p_k + \xi_{cv} p_k^*)$$

$$N^{e/h} = \frac{1}{L}\sum_k n_k^{e/h} = \frac{1}{2\pi}\int dk\ n_k^{e/h}$$





Ví dụ minh họa

Sử dụng $E_{\max} = 2.2 \times 10^6 \mathrm{V/cm}$, $\tau_L = 50$ fs, $\hbar\omega_L = 1.6$ eV

Khi trường mạnh các hiện tượng phi tuyến xuất hiện