Transporte Eletrônico Quântico – 2015/1

Lista de Exercícios nº 1 – Funções de Green e Matriz de Espalhamento

---

1. Recapitulação da introdução às funções de Green

   (a) Calcule a função de Green retardada para um elétron livre movendo-se em uma fio unidimensional infinito dando a equação de Schrödinger com um termo de fonte δ de Dirac

   $$(\hbar\omega - H + i\eta)G^R(x, x'; \omega) = \hbar\delta(x - x')$$

   it Dica: repita em detalhe os passos apresentados em sala de aula.

   (b) Repita o cálculo para a função de Green avançada $G^A(x, x'; \omega)$. Interprete seus resultados.

   (c) Calcule agora a função de Green para um elétron em um fio semi-infinito ($x > 0$). Use a condição de contorno em que $G(x = 0, x' > 0; \omega) = 0$.

2. Lembre-se da definição da função espectral $A(x, x'; \omega)$.

   (a) Mostre que para um elétron em um fio infinito

   $$A(x, x'; \omega) = \frac{1}{\pi v} \cos k(x - x').$$

   Use esta expressão para encontrar a densidade de estados eletrônica em uma dimensão. Multiplique por um fator 2 para incluir o spin.

   (b) Repita o exercício para o caso de um fio semi-infinito.

3. Usando a fórmula de Fisher e Lee calcule o elemento de matriz S_{11} para um fio semi-infinito, modelando uma reflexão perfeita. Interprete seu resultado.

4. *Espalhamento por função δ.* Considere um fio unidimensional contendo um espalhados singular de intensidade λ na posição $x = 0$, de modo que a equação de Schrödinger seja

   $$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \lambda\delta(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

   Resolva a equação de Schrödinger.

   (a) Mostre que para um um potencial atrativo ($\lambda < 0$) pode existir um estado ligado, de modo que $|\psi(x)|$ decresce exponencialmente para $|x| \to \infty$. Qual é a energia deste estado?

   (b) Mostre que a matriz S deste sistema é

   $$S = \frac{1}{i\hbar v - \lambda} \begin{pmatrix} \lambda & i\hbar v \\ i\hbar v & \lambda \end{pmatrix}.$$

5. *Espalhamento num modelo discreto.* Considere um modelo de sítios unidimensional do tipo *tight-binding*, descrito pelo hamiltoniano com integrais de transferência (“hoppings") de primeiros vizinhos

   $$H = -t \sum_n \Big(|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n| \Big) + \sum_n V_n |n\rangle\langle n|$$

onde t é o termo de hopping a o potencial V_n só não é nulo em um sítio

$$V_{n=1} = \varepsilon_1 \qquad \text{e} \qquad V_{n\neq 1} = 0 \ .$$

(Remendação: Leia sobre representações discretas no capítulo de funções de Green do livro do Datta.)

(a) Calcule os autovalores de H para o caso onde $\varepsilon_1 = 0$.

(b) Considere agora $\varepsilon_1 \neq 0$. Mostre que neste problema todos os autoestados com energias no intevalo $-2t < \varepsilon < 2t$ são estendidos e que existe no máximo um estado localizado com energia fora deste intervalo.

(c) Um esquema de diferenças finitas para dar conta da função δ consiste em colocá-la num ponto fixo, denominado por 1, segundo o esquema.

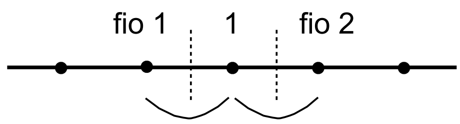

Figura 1: Esquema de partição do espaço real: fio 1 - condutor - fio 2.

Encontre o hamiltoniano efetivo unidimensional $H'_S = H_S + \Sigma$ e mostre que a função de Green retardada é dada por

$$[G_S(\omega)]_{11} = \frac{\hbar}{a} \frac{1}{\hbar\omega - (H'_S)_{11}}$$

que, no limite de $a \to 0$ se torna

$$[G_S(\omega)]_{11} = \frac{\hbar}{i\hbar v - \lambda}$$

(Não se esqueça se considerar a velocidade discretizada.

(d) Use a relação de Fisher-Lee para calcular a matriz S e verifique que é idêntica ao que você calculou no item anterior.