Problema 1: **Cruces evitados o Sincronización**?:

Un problema casi inevitable la mecánica clásica y cuántica son los acoplamientos indirectos. Esta ocurre cuando dos modos degenerados se acoplan indirectamente via un tercero. Esta situación podría ser descripta por la matriz dinámica

$$\mathbb{M} = \begin{bmatrix} \omega_1^2 & 0 & -\omega_{x1}^2 \\ 0 & \omega_2^2 & -\omega_{x2}^2 \\ -\omega_{x1}^2 & -\omega_{x2}^2 & \omega_i^2 \end{bmatrix} \qquad \#$$

Usaremos unidades de $[K/m]$, proponiendo ($\omega_1^2 = 6\ (K/m)$ y $\omega_2^2 = \omega_1^2 + x$ con $\omega_i^2 = 9$ y $\omega_2^2 = 1$ y los acoplamientos $\omega_{x1}^2 = \omega_{x2}^2 = 1$. Usar el método de la resolvente (función respuesta) exacta para graficar en el rango de frecuencias cuadráticas $5 \leq \omega^2 \leq 10$

$$\rho_1(\omega^2) = -\frac{1}{\pi}\operatorname{Im} D_{11}(\omega^2); \quad \rho_2(\omega^2) = -\frac{1}{\pi}\operatorname{Im} D_{22}(\omega^2); \quad \rho_i(\omega^2) = -\frac{1}{\pi}\operatorname{Im} D_{ii}(\omega^2) \qquad \#$$

$$\rho(\omega^2) = \rho_1(\omega^2) + \rho_2(\omega^2) \qquad \#$$

Regularice las frecuencias cuadráticas agregando una componente imaginaria $\delta \simeq \omega_1\eta = 0.1$Haga un graficio de nivel o 3d para verificar que efectivamente esta estructura produce cruces evitados.

y grafique los **cruces evitados** variando $-0.5 \leq x \leq 0.5$.

Discuta esta situacion física

SINCRONIZACIÓN. En un piano, los cruces evitados resultarían contradictorios con el requerimiento que dos cuerdas que puedan estar afinadas, es decir tener una única frecuencia, ya que siempre existirá un acoplamiento, por pequeño que sea que acoplará ambos modos. Las cuerdas de un doblete se acoplan a través de puente y la caja harmónica. En este caso podríamos describir el sistema intermediario como un sistema con un continuo de frecuencias, o equivalentemente con una gran fricción que permite la transición de fase dinámica al estado sincronizado/afinado. Repita los cálculos asumiendo para el modo intermediario una gran fricción $\left(\eta = \sqrt{6}\right)$ con lo que queda $\omega_i^2 = 9 - \mathrm{i}\omega\eta \simeq 9 - \mathrm{i}6$.

Discuta esta aproximación.

EXTRA POSGRADO: Justificar este resultado exacto mediante el método de la **transformación canónica** de **Schrieffer-Wolff**. Esta considera una parte no perturbada, $\mathbb{M}_0$ que es diagonal y contiene los estados de baja y alta energía o (frecuencias cuadrática) mientras que $\mathbb{V}$ es el acoplamiento que causa la interacción. Se busca un operador unitario $\exp[\mathrm{i}\mathbb{W}]$, con $\mathbb{W}$ a determinar, de modo que el nuevo Hamiltoniano (o matriz dinámica) $\widetilde{\mathbb{M}} = \exp[\mathrm{i}\mathbb{W}](\mathbb{M}_0 + \mathbb{V})\exp[-\mathrm{i}\mathbb{W}]$ no contenga términos lineales en $\mathbb{V}$. Se utiliza la fórmula de expansión de **Baker-Campbell-Hausdorff** para aproximar el Hamiltoniano o matrix dinámica transformado en una serie de conmutadores:

$$\widetilde{\mathbb{M}} = \mathbb{M}_0 + \mathbb{V} + \mathrm{i}[\mathbb{M}_0, \mathbb{W},] + \mathrm{i}[\mathbb{V}, \mathbb{W}] + \frac{1}{2}\mathrm{i}^2[[\mathbb{M}_0, \mathbb{W}], \mathbb{W}] + \ldots \qquad \#$$

En el cual elegimos $\mathbb{W}$ de manera que

$$\mathbb{V} + \mathrm{i}[\mathbb{M}_0, \mathbb{W},] \ = 0, \qquad \#$$

para obtener

$$\widetilde{\mathbb{M}} \simeq \mathbb{M}_0 + \frac{1}{2}\mathrm{i}[\mathbb{V}, \mathbb{W}]. \qquad \#$$

Verificar el procedimiento y obtener fórmulas explícitas para caso considerado.

Problema 2) **Self-energy**, **Función de Green y Densidad de estados para cadenas de átomos semi-infinitas e infinitas**.

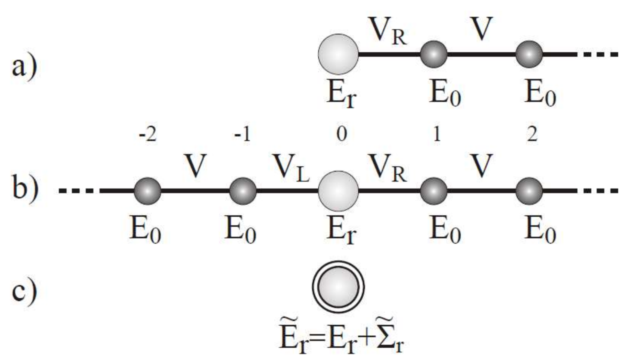
a) Considere una cadena infinita homogénea ($V_{n,n+1} = -V$; $E_n = E_0, \ \forall n$) calcule la self-energy $\Sigma(\varepsilon) \equiv \Delta(\varepsilon) - \mathrm{i}\Gamma(\varepsilon)$, grafique la parte real y la imaginaria y la LDOS.

b) Identificando $\varepsilon = \varepsilon(k)$, re-escriba la self-energy como función del quasi-momento $\hbar k$ y los parámetros del Hamiltoniano. En base a esto dé una interpretación para $\Gamma(\varepsilon)$.

c) Para una cadena semi-infinita homogénea ($V_{n,n+1} = -V$; $E_n = E_0, \ \forall n \geq 0$) obtenga la corrección (self-energy) de los sitios en la superficie e interiores (sitios 0, 1, 2). Calcule la densidad de estados local (LDOS) y grafíque cualitativamente en función de la energía. Interprete los máximos y los ceros de LDOS. Generalice para sitios interiores comparando con la LDOS de la cadena infinita.

Problema 3) **Estado resonante y Regla de Oro de Fermi**

Considere que el sitio 0 (orbital superficial, Fig.$1-a$) está debilmente acoplado a su vecino en la cadena semi-infinita ($V_{n,n\pm1} = -V \ \ \forall n > 0; V_{0,1} = V_R$; $E_n = E_B, \ \forall n > 0; E_0 = E_r$). Considerando la función de Green sobre la impureza $G_{0,0}(\varepsilon)$ en la aproximación de $\Gamma_r(\varepsilon) \simeq \left|\frac{V_r}{V}\right|^2 \Gamma(E_r)$ y $\Delta_r(\varepsilon) \simeq \left|\frac{V_r}{V}\right|^2 \Delta(E_r)$ grafique la densidad de estados en el sitio en la aproximación de banda ancha. A partir de la transformada de Fourier de la función de Green, evalúe la probabilidad de supervivencia en el estado: $P_{0,0}(t) = |G_{0,0}(t)|^2 = \left|\int G_{0,0}(\varepsilon) e^{-\mathrm{i}\varepsilon t/\hbar} \frac{d\varepsilon}{2\pi}\right|^2$. Extienda el resultado para el caso de la figura $1-b$.



Problema 4) **Transmisión a través de un estado resonante**.

Considere el Hamiltoniano del sistema de enlace fuerte (tight-binding) representado en la Fig. $1-b$, es decir, un estado con energía E_r acoplado a dos cadenas semi-infinitas ordenadas por los elementos por los elementos V_L y V_R. Este sistema podría representar un modelo simple de un punto cuántico conectado a dos electrodos. Calcule la probabilidad de transmisión $T_{R,L}(\varepsilon)$ como función de la energía cinética del electrón incidente ε. Obtenga la transmitancia mediante la fórmula de Fisher-Lee

$$T_{RL}(\varepsilon) = 2\Gamma_R |G_{0,0}^R|^2 2\Gamma_L,$$

donde $G_{0,0}^R(\varepsilon)$ se obtiene eliminando los electrodos y obteniendo un sistema effectivo de un sitio (Fig. $1-c$). Nótese que en este caso no es necesario recurrir a la aproximación de banda ancha. Grafique para $V_{L(R)} < V$

b) Demuestre la formula usada. Le sugerimos representar las amplitudes de la función de onda del lado izquierdo como $u_n = e^{ikna} + re^{-ikna}$ mientras que del lado derecho $u_n = te^{ikna}$, donde al igual en que en el continuo r y t son los coeficientes de reflexión y transmisión respectivamente. Encuentre una expresión para r y t y compare con la función de Green. Ayuda: escriba la ecuación para los nodos centrales y sus laterales. Eliminando los términos en t calcule $T_{RL} = 1-|r|^2$. (Ver Feynman III Cap.13-6).

Problema 5- Conmensurado o inconmensurado?

Edwing Schrödinger fue el primero en sugerir que las moléculas de la vida, como el ADN constituyen un cristál no-periódico una estructura molecular estable y no repetitiva que puede codificar la información necesaria para el desarrollo de un organismo. Esta teoría, fue expuesta en su libro *"¿Qué es la vida?"*. Douglas Hofstadter en su libro *"Gödel, Escher, Bach: Una eterna trenza dorada"*, introduce un modelo particular de sistema no-periódico, como una cadena lineal donde las energías (de ionización) orbitales elegidas de acuerdo a la prescripcion:

$$\varepsilon_n = W\cos[Qna] \qquad \#$$

donde $W = 2V$ donde V es la energía asociada al enlace covalente entre vecinos. De esta manera, el Hamiltoniano de enlaces fuerte resulta:

$$\mathbb{H} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & -V & 0 & 0 & \cdots \\ -V & \varepsilon_2 & -V & 0 & \cdots \\ 0 & -V & \varepsilon_3 & -V & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -V \\ 0 & 0 & 0 & -V & \varepsilon_N \end{bmatrix} \qquad \#$$

a) **Espectro de energías**:

Tomando $V = 1$ y $N = 100$ y usando el método de la **función de Green** o bien el de **matriz promoción** (teorema de oscilación) grafique la densidad de estados total

$$N(\varepsilon) = \sum_{n=1}^{\mathrm{N}} N_n(\varepsilon) \qquad \#$$

$$N_n(\varepsilon) \simeq \frac{-1}{\pi} \operatorname{Im} G_{nn}(\varepsilon + \mathrm{i}\delta) \qquad \#$$

para $Q = 2/a$ y para $Q = 2\pi/(3a)$ y δconvenientemente pequeño.
Considere los casos $W = 0.5V, W = 2V$ y $W = 3V$
Discuta los resultados.

b) **Transferencia electrónica**.
Conecte la cadena a sendas cadenas ordenadas semi infinitas y grafique la transmitancia

$$T_{RL}(\varepsilon) = 2\Gamma_L|G_{LR}(\varepsilon)|^2 2\Gamma_R \qquad \#$$

para los casos considerados en la sección anterior.
Discuta los resultados.