

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Funções de Wannier da equação de Schrödinger fracionária unidimensional: o pente de Dirac

Arianne Vellasco-Gomes¹

POSMAT, UNESP, Bauru, SP

Rubens F. Camargo², Alexys Bruno-Alfonso³

Departamento de Matemática, UNESP, Bauru, SP

1 Introdução

A equação de Schrödinger descreve a dinâmica dos estados quânticos das partículas. No presente trabalho, a equação de Schrödinger fracionária [2, 3] é resolvida para uma partícula num potencial periódico unidimensional. Isso é feito na intenção de estudar a dependência das bandas de energia e das funções de Wannier com a ordem da derivada fracionária. As bandas de energia e as funções de Bloch são numericamente calculadas para o potencial pente de Dirac, por diagonalização. Para obter funções de Wannier bem localizadas, as funções de Bloch são escolhidas a depender suavemente do vetor de onda.

2 Resultados

A equação de Schrödinger fracionária para os estados estacionários de uma partícula tem a forma $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, onde $\hat{H} = \hat{K} + V(x)$ é o operador Hamiltoniano. O termo de energia cinética é da forma, $\hat{K} = D_\alpha(-\hbar^2\Delta)^{\alpha/2}$, em que o segundo fator é a derivada de Riesz dada por

$$(-\hbar^2\Delta)^{\alpha/2}\psi(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixp/\hbar} |p|^\alpha dp \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixp/\hbar} \psi(x) dx. \quad (1)$$

Neste trabalho considera-se o potencial na forma de pente de Dirac com período a , isto é escrito como

$$V(x) = \beta D_\alpha(2\pi\hbar/a)^\alpha \sum_{m \in \mathbb{Z}} \delta\left(\frac{x}{a} - m\right). \quad (2)$$

As bandas de energia para $\beta = -0.2$ estão apresentadas na Figura 1(a) para dois valores da ordem da derivada fracionária: $\alpha = 2$ e 1.6 . Observa-se que o número de

¹ariannevellasco@fc.unesp.br

²rubens@fc.unesp.br

³alexys@fc.unesp.br

bandas de energia aumenta com o decréscimo de α . Portanto, pequenos valores da ordem de α podem ser associados com uma grande inércia da partícula.

As funções Bloch são autovetores do operador Hamiltoniano e dependem periodicamente do vetor de onda. As funções de Wannier são os coeficientes de Fourier da função de Bloch. Na Figura 1(b), são mostradas as funções de Wannier [1] para a primeira banda. Nota-se que a distribuição de probabilidade é mais concentrada próxima ao poço quântico na origem, para valores pequenos da ordem da derivada fracionária.

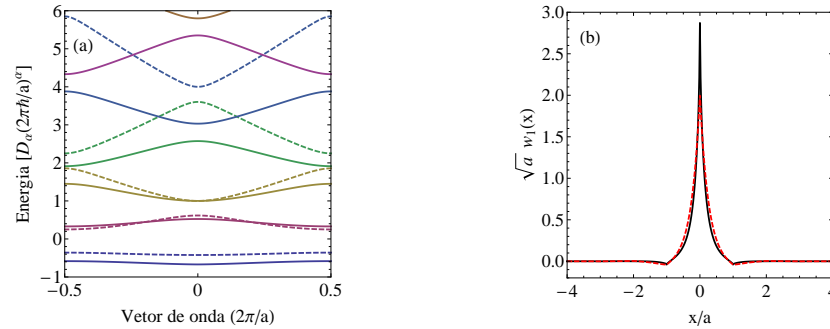


Figura 1: (a) Bandas de energia e (b) função de Wannier da primeira banda para o potencial pente de Dirac com $\beta = -0.2$. A energia cinética é dada pelo operador de Riesz de ordem $\alpha = 2$ (linha tracejada) e $\alpha = 1.6$ (linha contínua).

3 Conclusões

As bandas de energia e as funções de Wannier de um Hamiltoniano unidimensional com derivada espacial de ordem fracionária foram calculadas. Como derivada fracionária foi utilizado o operador de Riesz. Resultados numéricos foram dados para um potencial na forma de pente de Dirac. Foi mostrado que a quantidade de bandas no intervalo de energias investigado aumenta quando diminui a ordem da derivada fracionária de Riesz. Além disso, a distribuição de probabilidade das funções de Wannier fica concentrada na vizinhança de um dos poços quânticos.

Referências

- [1] A. Bruno-Alfonso and D. R. Nacbar. Wannier functions of isolated bands in one-dimensional crystals, *Phys. Rev. B*, 75:115428, 2007. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.115428
- [2] E. C. de Oliveira, F. S. Costa and J. Vaz. The fractional Schrödinger equation for delta potentials, *J. Math. Phys.*, 51:123517, 2010. DOI: 10.1063/1.3525976.
- [3] N. Laskin. Fractional Schrödinger equation, *Phys. Rev. E*, 66:056108, 2002. DOI: 10.1103/PhysRevE.66.056108.