41

"ESTUDO DE ELETRONS DE BLOCH EM UM CAMPO MAGNÉTICO UNIFORME"

LUIZ AUGUSTO CARVALHO MALBOUISSON

Tese Apresentada no Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas para a Obtenção do Título de Mestre em Ciências.

1975

41

"ESTUDO DE ELETRONS DE BLOCH EM UM CAMPO MAGNÉTICO UNIFORME"

LUIZ AUGUSTO CARVALHO MALBOUISSON

Tese Apresentada no Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas para a Obtenção do Título de Mestre em Ciências.

1975

À Morena

Agradeço ao Prof. Dr. Nelson de Jesus Parada pela orientação recebida.
Agradeço aos professores Ivan C. da Cunha Lima, Adolfo Hengenltraub e J.A.M.Moreira pelas discussões no decorrer desse trabalho.

R E S U M O

O presente trabalho é um estudo sobre o problema de um eletron de Bloch em um campo magnético uniforme. Nele basicamente discutimos o formalismo dos Hamiltonianos efetivos aplicado ao problema. Discutimos a representação introduzida por L.Roth. Introduzimos uma nova representação que apresenta o comportamento adequado no limite da rede vazia, isto é, $V(\vec{r}) \rightarrow 0$ e derivamos uma expressão para a aplicação do Hamiltoniano sobre as funções de Base.

---

* Trabalho realizado com auxílio da CAPES (Coordenação do Aperfeiçoamento do Pessoal de Nível Superior), Conselho Nacional de Pesquisas, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, Fundo Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico do Ministério do Planejamento , Banco Nacional de Desenvolvimento Econômico e Banco Interamericano de Desenvolvimento.

ÍNDICE

Capítulo I		Introdução	1
Capítulo II		Funções de Base de Roth	6
	II.1	Introdução	6
	II.2	Funções Básicas de Laura Roth e a derivação de um hamiltoniano efetivo.	6
	II.3	Os operadores Magnéticos de translação	12
	II.4	Derivação e prova da completeza das funções de Roth com a utilização dos operadores magnéticos de translação.	14
Capítulo III		Novas Funções de Base	23
	III.1	Introdução	23
	III.2	Derivação das novas funções de Base	23
	III.3	Prova da Completeza desse Conjunto de funções.	28
Capítulo IV		Hamiltoniano Efetivo	31
Capítulo V		Conclusões	36
Apêndice A			38
Apêndice B			44
Apêndice C			47
Apêndice D			48
Bibliografia			50

CAPITULO I

INTRODUCAO

O problema de um eletron de Bloch num campo magnético uniforme tem sido bastante estudado, desde o trabalho inicial de Landau[1] em 1930. Isso se deve ao fato de que muito dos experimentos com os quais se investigam as propriedades eletrônicas dos sólidos são levados a cabo com o auxílio de campos magnéticos. Deste modo, a interpretação dos resultados requer, em princípio, o conhecimento do comportamento dos eletrons do cristal sob a ação desses campos.

Num cálculo semi-clássico[2] se mostra que esses eletrons obedecem as equações,

$$\hbar\dot{\vec{k}} = \frac{e}{c}\,(\vec{v}\times\vec{B}) \tag{I.1.a}$$

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v} = \frac{1}{\hbar}\,\vec{\nabla}_{\vec{k}}\,E_n(\vec{k}) \tag{I.1.b}$$

que são utilizadas, por exemplo, na determinação de superfícies de Fermi.

O conhecimento completo do comportamento quanto-mecânico de um sistema é possível ser obtido se resolvemos a equação, estacionária de Schrödinger

$$H\phi = E\phi \tag{I.2}$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema. Isso significa encontrar as autofunções ϕ que diagonalizam H. Os autovalores dessa matriz diagonal são as energias possíveis para o sistema. Na maior parte dos casos entretanto, não se pode digonalizar diretamente H, como ocorre no problema de um eletron de Bloch num campo magnético. Nesse caso, o problema é normalmente desenvolvido dentro do chamado formalismo dos hamiltonianos efetivos, o qual consiste na introdução de um con junto de funções, completo para o problema, isto é, que gera o espaço das autofunções do sistema, o qual constitui uma base para o espaço. A introdução dessa base define assim uma representação, que origina uma nova matriz hamiltoniana, denominada hamiltoniano efetivo.

O tratamento dado por Landau (1930)[1] ao problema foi o de considerar os eletrons de condução como um gas de eletrons livres, - num campo magnético-uniforme. Ele logrou resolver exatamente a equação de onda, encontrando que, ao longo do campo, o movimento era idêntico ao caso do campo nulo. Já no plano normal ao campo, o comportamento era o de um oscilador harmônico.

R. Peierls (1933)[3] abordou o problema, pela primeira vez, dentro do formalismo dos hamiltonianos efetivos, considerando a expansão das autofunções do problema em termos do conjunto de orbitais atômicos, ou seja, uma LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals). Com isso foi levado em conta o efeito do potencial periódico, desprezado por Landau. Na verdade, a expansão (LCAO) utilizada é uma expansão modificada. Essa modificação decorre do fato de que o potencial vetorial $\vec{A}(\vec{r})$ que aparece no hamiltoniano magnético não é invariante por uma translação. $\vec{A}(\vec{r} - \vec{R})$, no entanto, descreve o mesmo - campo que $\vec{A}(\vec{r})$. Logo as duas expressões devem diferir pelo calibre. Assim, enquanto que no caso de campo nulo as orbitais atômicas transladadas são soluções locais satisfatórias no limite do "Tight biding" no caso em que o campo magnético é diferente de zero, Peierls as multiplica por fases, que se originam das mudanças de calibre provocadas pelas translações $T(\vec{R})$. Essas fases são conhecidas como fatores de fase de Peierls. Nesse caso, as autofunções e autovalores da energia podem ser conhecidos, se resolvemos a equação,

$$E_n[\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})]\phi = E\phi \tag{I.3}$$

onde $E_n(\vec{k})$ é banda de energia de índice n, no problema sem campo.

Esse resultado é também conhecido como, teorema de Peierls.

Luttinger e Kohn (1955)[4] introduziram uma representação conhecida como representação da massa efetiva, e definida por

$$X_n(\vec{k},\vec{r}) = U_n(\vec{k}_0,\vec{r})e^{i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (I.4)$$

onde $U_n(\vec{k}_0,\vec{r})$ é a parte periódica da função de Bloch, num ponto da zona de Brillouin. Essas funções constituem uma base para o problema do eletron de Bloch e dão origem ao conhecido hamiltoniano, $\vec{k}.\vec{p}$[5]. Ela é utilizada[11], entretanto, para derivar uma equação efetiva de Schrödinger no problema com campo, o que origina um hamiltoniano efetivo na forma de uma série de potências em B, ou seja $\sum_n f_n(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}))B^n$, onde o termo de ordem zero é o hamiltoniano de Peierls.

Wannier e Fredkin (1962)[6], mostraram a existência de um hamiltoniano efetivo geral, sem contudo apresentar a sua forma explicita, supondo a completeza de um conjunto de funções de Bloch modificadas. Essas funções se reduzem à funções de Bloch no limite de campo nulo. Elas são introduzidas através de uma equação, que se reduz à equação de onda do eletron de Bloch no limite de campo nulo. A validade dessa equação é assumida sem prova.

Roth (1962)[7], como descrevemos com maior detalhe no Capítulo II, propoz um conjunto de funções de Bloch mofificadas, que é suposto ser completo e que também se reduz ao das funções de Bloch, no limite $\vec{B} = 0$.

Em todas essas derivações as completezas dos conjuntos de funções são assumidas mas não provadas, sendo esse, a nosso ver um ponto fraco delas. A justificativa desse procedimento esta baseada no comportamento assintótico da base e dos resultados para o limite $\vec{B} \to 0$. Como comentam Wannier e Fredkin, "o que se assume é válido, pelo menos para alguma faixa de valores de $\vec{B}$, uma vez que é válido para $\vec{B} = 0$".

Brown (1964)[8] construiu um conjunto de funcões a partir - das representações irredutíveis do grupo das translações magnéticas. Primeiramente, ele obteve a forma analítica explícita para os operadores, num calibre qualquer. Mostrou Brown que eles não constituem um grupo vetorial (grupo ordinário) e sim um "ray group". Neste último, o fechamento existe, a menos de uma fase. Apesar de se poder generalizar completamente a teoria das representações para grupos - de ordem finita nesse caso Brown só conseguiu construir as representações irredutíveis, quando o campo $\vec{B}$ tem a direção de um vetor primitivo da rede. Com essas representações, através dos operadores de projeção, é possível obter funções com propriedades de transformação das autofunções do sistema, que são as funções naturais para - constituirem a base da expansão. Persiste, porém, a dificuldade da generalização dos resultados, para uma direção qualquer de $\vec{B}$.

Misra (1970)[9], mostrou ser possível, explorando a invariância translacional magnética pertinente às autofunções do problema derivar uma classe de representações para eletrons de Bloch em campo magnético uniforme e, em particular, derivou as funções de Roth, como veremos no Capítulo II. Num trabalho quase simultâneo[10], provou ele a completeza desse conjunto.

Retornando à idéia central do formalismo dos hamiltonianos efetivos, podemos observar que existe uma ligação forte entre , o hamiltoniano efetivo e a base que lhe dá origem. A nova matriz hamiltoniana "carrega", em algum grau, as "qualidades" das funções básicas. Assim, o comportamento do hamiltoniano derivado, quando $\vec{B}\to 0$, ou $V(\vec{r}) \to 0$, onde $V(\vec{r})$ é o potencial cristalino, está diretamente - ligado ao comportamento das funções básicas nesses limites e, é dentro deste espírito que se desenvolve o presente trabalho. As funções básicas propostas, até a presente data, tem como característica comum, o fato de se reduzirem às funções de Bloch, no limite de campo nulo, ou pelo menos constituirem bases para o problema nesse limite. Entretanto, não apresentam elas o comportamento requerido no caso em que $V(\vec{r}) \to 0$, ou seja, no limite da rede vazia. As funções de Roth, - por exemplo, nesse limite, são ondas planas e não funções de Landau. Assim sendo, se se conseguir derivar funções que apresentem o limite da rede vazia, deve-se esperar que o hamiltoniano efetivo, obtido a partir desse conjunto, retenha de forma explícita as características do sistema, sob a ação de um campo magnético forte. Em particular, o formalismo será de grande aplicabilidade no caso dos eletrons de condução de metais.

No Capítulo III mostramos como é possível construir um conjunto completo de funções que tenham a propriedade acima, isto é, - que apresentem o límite da rede vazia e, no Capítulo IV, desenvolvemos o hamiltoniano efetivo que com elas é obtido. O Capítulo V é destinado às conclusões e comentários.

CAPÍTULO II

FUNÇÕES DE BASE DE ROTH

II.1 - Introdução

Neste capítulo apresentamos, bàsicamente, todo o material necessário para a derivação do conjunto das funções básicas introduzidas por Roth[7], a prova da sua completeza, assim como a derivação do hamiltoniano efetivo obtido nessa representação.

II.2 - As funções Básicas de Laura Roth e a derivação de um hamiltoniano efetivo.

Para um eletron de Bloch, num campo magnético uniforme, o hamiltoniano que descreve o sistema é dado por

$$H = \frac{1}{2m}\left[\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})\right]^2 + V(\vec{r}) \tag{II.1}$$

onde $\vec{A}(\vec{r})$ é o potencial vetorial, aqui tomado no calibre linear, isto é, $\vec{A}(\vec{r}) = \vec{r}.\nabla A$, onde $\vec{\nabla}A$ é uma diada constante, por exemplo,

$$\nabla A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{II.2}$$

sendo $\vec{B}$ o campo magnético na direção z, escolha essa que nos dá o próprio calibre de Landau para o eletron livre num campo magnético uniforme; e é o valor absoluto da carga eletrônica e $V(\vec{r})$ é o potencial cristalino que é periódico. No hamiltoniano (II.1) termos envolvendo spin foram omitidos. A escolha do calibre de Landau é feita, afim de simplificar as expressões, mas os resultados são independentes dessa escolha, isto é, podem ser provados para um calibre qualquer*.

Roth[7] propõe, para funções básicas, o conjunto

$$\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} A_n(\vec{r} - \vec{R})e^{i(\vec{R} - \vec{r}).\left[\frac{1}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}'} + \frac{e}{\hbar c}\vec{A}(\vec{r}')\right]} e^{i\vec{k}.\vec{r}'}\Big]_{\vec{r}' = \vec{r}}$$

(II.3)

que são as funções obtidas das funções de Bloch, na sua expansão em termos das funções de Wannier,

$$b_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} A_n(\vec{r} - \vec{R})e^{i\vec{R}.\vec{k}} = \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} A_n(\vec{r} - \vec{R})e^{i(\vec{R} - \vec{r}).\vec{k}}\right] e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

$$= U_{n\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}.\vec{r}} \qquad \text{(II.4)}$$

Substituindo $\vec{k}$ por $\vec{P} = \frac{1}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}'} + \frac{e}{hc}\vec{r}'.\vec{\nabla}\vec{A}$, em $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$. A ação do operador $U_{n\vec{P}}(\vec{r})$ é sobre a onda plana, sòmente. As diferentes componentes de $\vec{P}$ não comutam entre si, pois,

$$[P_x, P_y] = \frac{e}{i\hbar c}\left[\frac{\partial Ay}{\partial x} - \frac{\partial Ax}{\partial y}\right] = \frac{eB}{i\hbar c}$$

para o calibre de Landau

$$\vec{A}(\vec{r}) = - By\vec{e}_x$$

---

* Se procedemos uma mudança de calibre,

$$A' \to A + \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(\vec{r})$$

a função de onda fica, como mostra Landau[1], multiplicada por uma fase,

$$\psi \to \psi\, e^{i\frac{e}{\hbar c}f(\vec{r})}$$

que deixa invariantes todos os observáveis físicos do sistema.

Então, a ordem dos fatores (componentes de $\vec{P}$) é importante e na definição (II.3) das $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$, o operador $\vec{P}$ entra numa forma completamente simétrica. As funções $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ ficam, assim muito bem definidas.

Entretanto as funções $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ não são ortornormais. É suposto, contudo, que elas formam um conjunto completo. Isso equivale a dizer que a expansão da função de onda, solução da equação de Schrödinger para o hamiltoniano (II.1), em termos dessas funções, é possível. Isto é:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n\vec{k}} \phi_{n\vec{k}}(\vec{r})\psi_n(\vec{k}) \qquad (II.5)$$

Esse é o ponto débil do trabalho de Roth. Os resultados obtidos, a partir dessa expansão, não são a rigor válidos, uma vez que não foi demonstrada a completeza do conjunto das $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$. O uso dessas funções, entretanto, fica "justificado" pelo menos "intuitivamente" - para campos pequenos, como já expuzemos no capítulo anterior.

Levando-se a expansão (II.5) à equação de onda, obtém-se

$$\sum_{n'\vec{k}'} H\phi_{n'\vec{k}'}(\vec{r})\psi_{n'}(\vec{k}') = E \sum_{n'\vec{k}'} \phi_{n'\vec{k}'}(\vec{r})\psi_{n'}(\vec{k}') \qquad (II.6)$$

Multiplicando ambos os termos de (II.6) por $\phi^*_{n\vec{k}}(\vec{r})$ e integrando, em todo o cristal resulta:

$$\sum_{n'\vec{k}'}\left[\int d^3r\phi^*_{n\vec{k}}(\vec{r})H\phi_{n'\vec{k}'}(\vec{r}) - E\int d^3r\phi^*_{n\vec{k}}(\vec{r})\phi_{n'\vec{k}'}(\vec{r})\right]\psi_{n'}(\vec{k}') = 0 \qquad (II.7)$$

Para se calcular os elementos de matriz e as integrais - de normalização as funções $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ são escritas na forma,

$$\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} A_n(\vec{r} - \vec{R})e^{i\vec{k}.\vec{r}}\, e^{i\frac{e}{\hbar c}(\frac{\vec{R} + \vec{r}}{2}).\nabla A.(\vec{R} - \vec{r})} \qquad (II.8)$$

Após um extenso cálculo se obtem:

$$\int \phi^*_{n\vec{k}}(\vec{r}) H \phi_{n'\vec{k}'}(\vec{r}) d^3r = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}\vec{R}'} e^{-i\frac{e}{\hbar c}(\vec{R}'+\frac{\vec{R}}{2}).\nabla A.\vec{R}} e^{i(\vec{k}'-\vec{k}).\vec{R}'} e^{-i\vec{k}.\vec{R}} H_{nn'}(\vec{R}) \quad (II.9)$$

onde

$$H_{nn'}(\vec{R}) = \int d^3r\ A^*_n(\vec{r}-\vec{R}) e^{i\vec{h}.\vec{r}x(\vec{r}-\vec{R})} \left[\frac{1}{2m}(\vec{p}+\hbar\vec{h}x\vec{r})^2 + V(\vec{r})\right] A_{n'}(\vec{r}) \quad (II.10)$$

$$\vec{h} = \frac{e\vec{B}}{2\hbar c} \quad (II.11)$$

Com o uso da identidade,

$$\sum_{\vec{R}'} e^{i(\vec{k}'-\vec{k}).\vec{R}'} = N\Delta_{\vec{k}\vec{k}'} \quad (II.12)$$

é possível mostrar que,

$$\int \phi^*_{n\vec{k}}(\vec{r}) H \phi_{n'\vec{k}'}(\vec{r}) d^3r = \sum_{\vec{R}} H_{nn'}(\vec{R}) e^{-i\vec{R}.[\vec{k}+\frac{e}{c}\vec{A}(i\vec{\nabla}_{\vec{k}})]} \Delta_{\vec{k}\vec{k}'} \quad (II.13)$$

sendo, $\Delta_{\vec{k}\vec{k}'} = 0$, a menos que $\vec{k} = \vec{k}' + \vec{G}$, onde $\vec{G}$ é um vetor da rede reciproca. Para $\vec{k}$ e $\vec{k}'$ na primeira zona de Brillouim, $\Delta_{k\vec{k}'}$ é a função δ de Kronecker.

A variável $\vec{k}$ é considerada como uma variável contínua. Para o campo magnético nulo, os $H_{nn'}(\vec{R})$ são os coeficientes da expansão de Fourier da Energia $E_n(\vec{k})\delta_{nn'}$, pois;

$$\begin{aligned} H_{nn'}(\vec{R})_{\vec{B}\to 0} &= \int d^3r\ A^*_n(\vec{r}-\vec{R})\left[\frac{1}{2m}\vec{p}^2 + V(\vec{r})\right] A_{n'}(\vec{r}) \\ &= \varepsilon_n(\vec{R})\delta_{nn'} \end{aligned} \quad (II.14)$$

Este resultado pode ser facilmente obtido, se consideramos o elemento de matriz do hamiltoniano do eletron de Bloch entre funções de Wannier, o qual é [11]

$$H_{j'm,jn} = \int d^3r A^*_{j'}(\vec{r} - \vec{R}_m) H A_j(\vec{r} - \vec{R}_n) = \varepsilon_j(\vec{R}_m - \vec{R}_n)\delta_{jj'} \qquad (II.15)$$

Os elementos de matriz de H entre as funções $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ reduzem-se, no limite de campo nulo, à:

$$\lim_{\vec{B}\to 0} \sum_{\vec{R}} H_{nn'}(\vec{R}) e^{-i\vec{R}.\vec{k}} = E_n(\vec{k})\delta_{nn'} \qquad (II.16)$$

onde $E_n(\vec{k})$ é a banda de energia de índice n. Ainda nesses elementos de matriz, o operador é considerado como construido a partir da função

$$H_{nn'}(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}} H_{nn'}(\vec{R}) e^{-i\vec{R}.\vec{k}} \qquad (II.17)$$

substituindo-se $\vec{k}$ por $\vec{K} = \vec{k} + \frac{e}{\hbar c}\vec{A}(i\vec{\nabla}_{\vec{k}})$. A substituição é feita no expoente da expansão de Fourier, o que garante, para a função, uma forma simétrica em $\vec{k}$, a qual é necessária, uma vez que as diferentes componentes de $\vec{K}$ não comutam. Suas relações de comutação são as mesmas de $\vec{P}$.

As integrais de normalização (II.9) resultam em;

$$\int d^3r \phi^*_{n\vec{k}}(\vec{r})\phi_{n'k'}(\vec{r}) = N_{nn'}(\vec{K})\Delta_{\vec{k}\vec{k}'} \qquad (II.18)$$

onde $N_{nn'}(\vec{K})$ é o operador simétrico obtido de

$$N_{nn'}(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}} \int d^3r A^*_n(\vec{r} - \vec{R}) e^{i\vec{h}.\vec{r}x(\vec{r} - \vec{R})} A_{n'}(\vec{R}) e^{-i\vec{R}.\vec{k}} \qquad (II.19)$$

substitutindo $\vec{k}$ por $\vec{K}$ na exponencial. No limite de campo nulo, as integrais de normalização reproduzem a ortogonalidade das funções de Bloch, como esperado. Usando-se a relação,

$$\omega \quad \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}'\vec{R}} e^{i(\vec{k}'-\vec{k}).\vec{R}} \psi_{n'}(\vec{k}') = \psi_{n'}(\vec{k}) \qquad (II.20)$$

cuja validade exige a periodicidade em $\vec{k}'$ de $\psi_{n'}(\vec{k}')$ que é aqui assumida, torna-se possível encontrar a equação de Schrödinger,

$$\sum_{n'} \left[H_{nn'}(\vec{K}) - EN_{nn'}(\vec{K})\right]\psi_{n'}(\vec{k}) = 0 \qquad (II.21)$$

que, no limite de campo nulo, é diagonal como era esperado.

Para uma aplicação prática, torna-se, então, necessária a resolução da equação secular (II.7), utilizando-se a expressão (II.13) para o elemento de matriz do Hamiltoniano e a relação (II.18) para as integrais de normalização.

II.3 - Os operadores magnéticos de translação

Consideremos a ação do operador de translação ordinária $T(\vec{R})$, nos dois membros da equação de Schrödinger de um eletron de Bloch num campo magnético uniforme. Temos:

$$T(\vec{R})\, H\phi(\vec{r}) = T(\vec{R})\left[\frac{1}{2m}\left[\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})\right]^2 + V(\vec{r})\right]\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r} - \vec{R}) \qquad \text{(II.22)}$$

o que implica que

$$T(\vec{R})H = \left[\frac{1}{2\,m}\left[\vec{p} + \frac{e}{c}\,\vec{A}(\vec{r} - \vec{R})\right]^2 + V(\vec{r})\right] T(\vec{R}) = H'T(\vec{R}) \qquad \text{(II.23)}$$

O operador H', a menos do potencial vetorial, é o mesmo que H. Mas o potencial vetorial transladado ainda define o mesmo campo magnético, pois

$$T(\vec{R})\text{rot}\,\vec{A}(\vec{r}) = \text{rot}\,\vec{A}(T^{-1}(\vec{R})\vec{r}) = \text{rot}\,\vec{A}(\vec{r} - \vec{R}) \qquad \text{(II.24)}$$

e como

$$T(\vec{R})\vec{B}(\vec{r}) = \vec{B}(T^{-1}(\vec{R})\vec{r}) = B(\vec{r} - \vec{R}) \qquad \text{(II.25)}$$

obtemos

$$\vec{B}(\vec{r} - \vec{R}) = \text{rot}\,\vec{A}(\vec{r} - \vec{R}) = \vec{B}(\vec{r}) \qquad \text{(II.26)}$$

Dessa maneira, H' e H descrevem a mesma situação física, devendo diferir apenas no calibre, isto é:

$$\vec{A}(\vec{r} - \vec{R}) = \vec{A}(\vec{r}) - \frac{\hbar c}{e}\,\vec{\nabla}_{\vec{r}}\, f(\vec{r}) \qquad \text{(II.27)}$$

onde $f(\vec{r})$ é uma função real.

Por outro lado, sabemos que uma mudança de calibre no hamiltoniano é levada a cabo por uma transformação unitária da forma

$$U = e^{if(\vec{r})} \qquad \text{(II.28)}$$

Isso significa que,

$$H' = U^{+}HU \qquad \text{(II.29)}$$

donde

$$T(\vec{R})H = U^{+}HUT(\vec{R}) \qquad \text{(II.30a)}$$

$$[UT(\vec{R})]H = H[UT(\vec{R})] \qquad \text{(II.30b)}$$

Os operadores $UT(\vec{R})$ comutam com H e são denominados operadores magnéticos de translação. Embora eles não constituam um grupo vetorial - (grupo ordinário), eles formam um "ray group". A diferença é que a condição de fechamento da operação de multiplicação do grupo existe a menos de uma fase, que não pode desaparecer completa e unicamente por uma redefinição das fases dos operadores. Apesar disso, a teoria das representações, desenvolvida para grupos vetoriais, pode ser prontamente generalizada para os "ray groups", como mostra Brown[8].

Para obtermos o operador magnético de translação, com o hamiltoniano expresso num dado calibre, devemos, portanto, resolver a equação:

$$\vec{A}(\vec{r} - \vec{R}) = \vec{A}(\vec{r}) - \frac{\hbar c}{e} \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(\vec{r}) \qquad \text{(II.31)}$$

para encontrar $f(\vec{r})$. No calibre linear, |vide (II.2)| temos:

$$(\vec{r} - \vec{R}).\nabla A - \vec{r}.\nabla A = - \frac{\hbar c}{e} \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(\vec{r})$$

donde

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}} f(\vec{r}) = \frac{e}{\hbar c} \vec{R}.\nabla A \qquad \text{(II.32)}$$

ou,

$$\frac{\partial f(\vec{r})}{\partial x} = -\frac{e}{\hbar c} \left|\vec{R}.\nabla A\right| \qquad \text{(II.33a)}$$

$$\frac{\partial f(\vec{r})}{\partial y} = 0 \qquad \text{(II.33b)}$$

$$\frac{\partial f(\vec{r})}{\partial z} = 0 \qquad \text{(II.33c)}$$

A análise das equações acima nós leva a concluir que,

$$f(\vec{r}) = \frac{e}{\hbar c} \vec{R}.\nabla A.\vec{r} + C \qquad (II.34)$$

onde C é uma constante arbitrária. Assim, o operador magnético de translação no calibre linear é:

$$T(\vec{R}) = UT(\vec{R}) = e^{i\frac{e}{\hbar c} \vec{R}.\nabla A.\vec{r} + C} e^{i\vec{R}.\vec{p}/\hbar} \qquad (II.35)$$

Fazendo

$$C = i\frac{e}{\hbar c} \vec{R}.\nabla A.\vec{R}$$

$T(\vec{R})$ pode ser escrito como

$$T(\vec{R}) = e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c} \nabla A.\vec{r})} e^{i\frac{e}{\hbar^2 c} \vec{R}.\nabla A.\vec{R}} \qquad (II.36)$$

pois os operadores, $\vec{R}.\vec{p}$ e $\vec{R}.\vec{\nabla}\vec{A}.(\vec{R}+\vec{r})$, comutam. A fase no operador é entretanto irrelevante.

II.4 - Derivação e prova da completeza das funções de Roth com a utilização dos operadores magnéticos de translação.

Como foi salientado no item II.2, a validade dos cálculos de Roth não fica rigorosamente estabelecida, uma vez que não foi mostrada a completeza do conjunto utilizado na expansão da função de onda. Misra[9,10] mostrou, entretanto, ser possível derivar e provar a completeza do conjunto de Roth, o que é apresentado a seguir.

Para o eletron de Bloch num campo magnético uniforme, o hamiltoniano, com $\vec{A}(\vec{r})$ no calibre linear e sem os termos de spin, é dado por (II.1), isto é:

$$H = \frac{1}{2m} [\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{r}.\nabla A]^2 + V(\vec{r})$$

Por outro lado, vimos, pela relação (II.36), que os operadores magnéticos de translação são dados por

$$T(R) = e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\nabla A.\vec{r})} \qquad (II.37)$$

a menos de uma fase, irrelevante, como veremos abaixo.

São propostas, como funções básicas, em analogia com as funções de Bloch, que são as soluções no caso de campo zero, funções da forma:

$$\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \hat{C}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})e^{i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (II.38)$$

onde C_n é um operador que depende de $\vec{k}$, $\vec{B}$, $\vec{r}$. Pretende-se encontrar uma forma para o operador $\hat{C}_n$, tal que o conjunto das $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$, seja completo, isto é, seja possível expandir a função de onda, solução do problema, em termos desse conjunto. Tem-se, então

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}} [\hat{C}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})e^{i\vec{k}.\vec{r}}]\psi_n(\vec{k},t) \qquad (II.39)$$

considerando a soma em $\vec{k}$, no limite de $\vec{k}$ contínuo, pode-se também escrever;

$$\psi(\vec{r},t) = \text{const} \times \sum_n \int d^3k\ [\hat{C}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})e^{i\vec{k}.\vec{r}}]\ \psi_n(\vec{k},t)$$

$$= \text{const} \times \sum_n < \hat{C}^*_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})e^{-i\vec{k}.\vec{r}} |\psi_n(\vec{k},t)>$$

$$= \text{const} \times \sum_n < e^{-i\vec{k}.\vec{r}} |(\hat{C}^*)^+\psi_n(\vec{k},t)> = \text{const} \times \sum_n \int d^3k e^{i\vec{k}.\vec{r}}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t$$

$$= \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) \qquad (II.40)$$

sendo $\hat{D}_n = (\hat{C}_n{}^*)^+$. Aplicando o operador magnético de translação (II.37) à função acima, isto é

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\nabla A.\vec{r})} \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t)$$

resulta, de acordo com o apresentado no Apêndice B,

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\, e^{i\vec{R}.(\vec{p}+\hbar\vec{K}_0)}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) \qquad (II.41)$$

onde

$$\vec{K}_0 = \vec{k} + \frac{e}{\hbar c}\nabla A.i\vec{\nabla}_{\vec{k}} \qquad (II.42)$$

Como $T(\vec{R})\psi(\vec{r},t)$ é também autofunção de H com mesmo autovalor, pode-se, então, escrever, em analogia com (II.40) (vide Apêndice C).

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = \psi'(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi'_n(\vec{k},t) \qquad (II.43)$$

As relações (II.41) e II.43) devem, pela propriedade translacional, ter a mesma forma. Devido à presença do operador de translação ordinária no operador

$$e^{i\vec{R}.(\vec{p}+\hbar\vec{K}_0)}$$

$\hat{D}_n$ deve ser, então, uma função periódica em $\vec{r}$ na rede real. Mas $\hat{D}_n$ deve comutar também com o operador $e^{i\vec{R}.h\vec{K}_0}$. Isso é, entretanto, satisfeito, se $\hat{D}_n$ for função de um operador $\vec{K}$, que comute com $\vec{K}_0$.
Todavia as componentes de $\vec{K}_0$ não comutam, sendo que

$$[K_{0_x},K_{0_y}] = \frac{ieB}{\hbar c}$$

Definindo-se um operador $\vec{K}$, por

$$\vec{K} = \vec{k} + \frac{e}{\hbar c} i\vec{\nabla}_{\vec{k}}.\nabla A \qquad (II.44)$$

donde

$$[K_x,K_y]_- = \frac{-ieB}{\hbar c}$$

pode-se facilmente mostrar que

$$|\vec{K}, \vec{K}_o| = 0$$

a qual é válida entre as componentes dos vetores, isto é, temos nove relações de comutação do tipo

$$|K_{x_i}, K_{o_{x_j}}|_- = 0 \qquad i,j = 1, 2, 3$$

Portanto, $\hat{D}_n$ deve, desde que as diferentes componentes de $\vec{K}$ não comutam, ser definida como uma função simétrica de $\vec{K}$.

Até este ponto determinamos as condições a serem satisfeitas pelas funções $\phi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$. Falta, agora, apresentar uma forma mais explícita para essas funções. Misra impõe, então, que elas se reduzam às funções de Bloch para $\vec{B} = 0$. Isso é satisfeito se

$$\hat{D}_n(\vec{K},\vec{B},\vec{r}) = U_{n\vec{K}}(\vec{r}) \qquad \text{(II.45)}$$

ou seja, $\hat{D}_n$ é o operador obtido pela substituição simétrica de $\vec{k}$ por $\vec{K}$ na parte periódica da função de Bloch, da mesma forma descrita na definição das funções de Roth. Mas como qualquer função simétrica de $\vec{K}$ pode ser expandida como (vide Apêndice D).

$$f(\vec{K}) = \int d\vec{\rho}\; e^{-i\vec{\rho}.\vec{K}} f(\vec{\rho})$$

e como $\vec{K}$ é hermiteano, então

$$f^+(\vec{K}) = \int d\vec{\rho}\; e^{i\vec{K}.\vec{\rho}} f^*(\vec{\rho})$$

Daí, $\qquad f^+(\vec{K}) = [f(\vec{K}^*)]^*$

ou, $\qquad [f^+(\vec{K})]^* = f(\vec{K}^*) \qquad$ (II.46)

Aplicando a relação (II.46) à definição de $\hat{C}_n$, temos

$$\tilde{C}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r}) = U_{n\vec{K}^*}(\vec{r}) \qquad (II.47)$$

e as funções básicas resultam em

$$\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})e^{i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (II.48)$$

ou, mais explicitamente,

$$\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} a_n(\vec{r} - \vec{R})e^{i(\vec{R} - \vec{r}).[\vec{k} + e/\hbar c(-i\vec{\nabla}_{\vec{k}}).\vec{\nabla}\vec{A}]} \left. e^{i\vec{k}.\vec{r}'} \right]_{\vec{r}' = \vec{r}} \qquad (II.49)$$

Se, entretanto, na expressão (II.49) acima tomamos o operador exponencial na sua expansão em série de potências, isto é,

$$e^{i(\vec{R} - \vec{r}).[\vec{k} + e/\hbar c(-i\vec{\nabla}_{\vec{k}}).\vec{\nabla}\vec{A}]} = \sum_j \frac{1}{j!} \left\{ i(\vec{R} - \vec{r}).[\vec{k} + e/\hbar c(-i\vec{\nabla}_{\vec{k}}).\nabla A] \right\}^j \qquad (II.50)$$

ela poderá ser escrita de um modo diferente. Considerando-se o termo linear da expansão obtemos.

$$i(\vec{R} - \vec{r}).[\vec{k} + e/\hbar c(-i\vec{\nabla}_{\vec{k}}).\vec{\nabla}\vec{A}]e^{i\vec{k}.\vec{r}'} = i(\vec{R} - \vec{r}).[\tfrac{1}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}'} + e/\hbar c\vec{A}(\vec{r}')]e^{i\vec{k}.\vec{r}'}$$

Procedendo, então por indução, retornamos à forma exponencial, o que nos permite reescrever a função básica (II.49) na forma:

$$\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} A(\vec{r} - \vec{R})e^{i(\vec{R} - \vec{r}).[\frac{1}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}'} + e/\hbar c\vec{A}(\vec{r}')]} \left. e^{ik.r'} \right|_{\vec{r}' = \vec{r}} \qquad (II.51)$$

que são as funções de Roth.

Para mostrar a completeza desse conjunto, Misra[10] utilizou o seguinte procedimento. Vamos supor que o conjunto não é completo. Reunimos, então, a ele um conjunto de funções de forma semelhante,

$$X_{m\vec{k}}(\vec{r}) = \hat{F}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r})e^{i\vec{k}.\vec{r}} \tag{II.52}$$

tal que a reunião seja um conjunto completo. Dessa forma, podemos escrever:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} U_{n\vec{K}}(\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) + \sum_{m\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} \hat{G}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_m(\vec{k},t) \tag{II.53}$$

onde

$$\hat{G}_m = (\hat{F}_m^*)^+$$

Aplicando o operador magnético de translação à função de onda (II.53), isto é,

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = e^{i\vec{R}.(\vec{p} + e/\hbar c\ \vec{\nabla}\vec{A}.\vec{r})} \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} U_{n\vec{K}}(\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) +$$

$$+ e^{i\vec{R}.(\vec{p} + e/\hbar c\ \vec{\nabla}\vec{A}.\vec{r})} \sum_{m\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} \hat{G}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_m(\vec{k},t)$$

encontramos:

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} [e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)}] U_{n\vec{K}}(\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{m\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} [e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)}] \hat{G}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_m(\vec{k},t) \tag{II.54}$$

O mesmo raciocínio anterior aqui se aplica, mostrando-se que $\hat{G}_m$ de ve ser função periódica de $\vec{r}$, bem como função simétrica de $\vec{K}$. Para obter um operador simétrico em $\vec{K}$, definimos uma função através de sua transformada de Fourier

$$G_m(\vec{k},\vec{r}) = \int d\vec{\rho}\; e^{-i\vec{k}.\vec{\rho}}\, G_m(\vec{\rho},\vec{r})$$

sendo $\tilde{G}_m$ uma função perīodica na rede real. O operador $\tilde{G}_m(\vec{K},\vec{r})$ ē obtido de $\tilde{G}_m(\vec{k},\vec{r})$, substituindo-se $\vec{k}$ por $\vec{K}$ na exponencial, isto ē, simetricamente. Como $\tilde{G}_m(\vec{k},\vec{r})$ ē perīodica em $\vec{r}$, pode-se expandi-la em termos, das funções $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$, parte perīdica das funções de Bloch, que formam um conjunto completo com respeito ā funções perīodicas na rede real. Esta ūltima afirmativa pode ser facilmente provada se colocarmos, na equação de Schrödinger

$$\left[\frac{1}{2m}\,\vec{p}^2 + V(\vec{r})\right]\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

a forma de Bloch para as funções de onda

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}.\vec{r}}\, U_{\vec{k}}(\vec{r}) \qquad \text{(II.55)}$$

onde o nūmero quântico $\vec{k}$ segue da invariancia translacional. Esses vetores são definidos no espaço recīproco e tem a forma.

$$\vec{k} = k_1\vec{a}^* + k_2\vec{b}^* + k_3\vec{c}^*$$

onde $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$, $\vec{c}^*$ formam a terna primitiva da rede definida naquele espaço.

Com essa substituição encontramos uma equação de autovalores para a função $U_{\vec{k}}(\vec{r})$, que ē perīodica na rede real.

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\,(k^2 - \vec{\nabla}^2_{\vec{r}}) - \frac{i\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{\nabla}_{\vec{r}} + V(\vec{r})\right]U_{\vec{k}}(\vec{r}) = EU_{\vec{k}}(\vec{r}) \qquad \text{(II.56)}$$

Para cada valor de $\vec{k}$ e com as condições de contorno,

$$U_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = U_{\vec{k}}(\vec{r}) \qquad \text{(II.57a)}$$

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}} U_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = \vec{\nabla}_{\vec{r}} U_{\vec{k}}(\vec{r}) \qquad \text{(II.57b)}$$

o problema de auto-valor tem um número infinito de soluções, que são caracterizadas por um índice n. O mesmo rótulo é dado aos auto-valores E, que, obviamente, são funções de $\vec{k}$. Dessa forma, resulta a equação,

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\,(k^2 - \vec{\nabla}^2_{\vec{r}}) - \frac{i\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{\nabla}_{\vec{r}} + V(\vec{r})\right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) U_{n\vec{k}}(\vec{r}) \qquad \text{(II.58)}$$

Para qualquer função satisfazendo as mesmas condições de contorno (II.57), as $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$ constituem um conjunto completo, propriedade essa válida, em geral, para as autofunções de um problema de auto-valor.

Então podemos escrever para $G_m(\vec{k},\vec{r})$,

$$G_m(\vec{k},\vec{r}) = \sum_n a_{nm} U_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

onde os coeficientes a_{nm} são independentes de $\vec{k}$. Por conseguinte,

$$\hat{G}_m(\vec{K}^*,\vec{r}) = \sum_n a_{nm} U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$$

onde $U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$ é obtido de $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$, substituindo-se $\vec{k}$ por $\vec{K}^*$.

Entretanto, como a relação (II.46) vale para qualquer função simétrica de $\vec{k}$, então

$$[\hat{G}_m^+(\vec{K})]^* = \hat{G}(\vec{K}^*) = \hat{F}_m(\vec{K},\vec{B},\vec{r})$$

ou

$$\hat{F}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r}) = \sum_n a_{nm} U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$$

e, portanto

$$X_{m\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_n a_{nm}\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \qquad \text{(II.59)}$$

Assim sendo, qualquer função do conjunto das $X_{m\vec{k}}(\vec{r})$ pode ser escrita como uma combinação linear das funções $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$. Portanto, as funções $X_{m\vec{k}}(\vec{r})$ não são independentes, donde o conjunto das $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ é completo, com respeito à função de onda do - Hamiltoniano de um eletron num potencial periodico e sob a ação de um campo magnético uniforme.

Embora as funções de Roth tendam às funções de Bloch no limite $\vec{B}\to 0$, elas não apresentam o limite desejavel, quando o potencial cristalino $V(\vec{r})$ é pequeno, condição essa satisfeita no caso de metais sob a ação de campos magnéticos intensos. É facil observar que quando $V(\vec{r})$ tende a zero, então $U_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ é independente de $\vec{k}$ e, nesse caso, as funções de Roth são ondas planas. Entretanto, no limite da rede vazia, as autofunções do Hamiltoniano (II.1) são as funções de Landau. Certamente, para se conseguir expressar estas últimas em termos do conjunto de ondas planas, um número muito grande de termos será necessário, tornando a diagonalização da matriz secular muito trabalhosa.

CAPÍTULO III

NOVAS FUNÇÕES DE BASE

III.1 - Introdução

Vamos mostrar, neste capítulo, como é possível obter um conjunto completo de funções, para o problema do eletron de Bloch num campo magnético uniforme, que apresenta o limite da rede vazia, isto é, as funções de base se reduzem às funções de onda do eletron livre num campo magnético uniforme (funções de Landau[1]), quando $V(\vec{r}) \to 0$. A derivação do conjunto e a prova da sua completeza serão feitas utilizando o mesmo método introduzido por Misra[9,10].

III.2 - Derivação das novas funções de base

Vamos considerar o Hamiltoniano (II.1), com o potencial vetor $\vec{A}(\vec{r})$ expresso no calibre linear.

Para funções de base vamos escolher funções da forma,

$$\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r}) = \hat{C}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\left[e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y)\right] \tag{III.1}$$

onde

$$P_\ell(k_x,\vec{B},y) = a_\ell(\vec{B})\, H_\ell[f(k_x,\vec{B},y)]\, e^{-1/2[f(k_x,\vec{B},y)]^2}$$

$$f(k_x,\vec{B},y) = \lambda^{-1/2}(y - \lambda k_x) \qquad , \qquad \lambda = c\hbar/eB$$

e $H_\ell(x)$ é o polinômio de Hermite de grau ℓ. $\hat{C}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})$ é um operador com dependências funcionais em $\vec{k},\vec{B}$ e $\vec{r}$ a serem determinadas. Em (III.1) a função que segue a esse operador é a função do eletron livre de Landau. Tal definição não envolve aproximações, pois é sempre possivel encontrar um operador que aplicado numa função, nos dá outra função. Essa é, portanto, uma forma natural das funções básicas, se desejamos obter o limite da rede vazia. O conjunto é suposto completo e, por isso, podemos expandir a função de onda $\psi(\vec{r},t)$ em termos de funções a ele pertencentes:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} \phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \qquad \text{(III.2)}$$

Como foi discutido no Capítulo anterior, a soma em $\vec{k}$ deve ser vista como uma integral em $\vec{k}$, isto é, no limite de $\vec{k}$ contínuo. Mantendo, entretanto a somatória por conveniência e utilizando a expressão (III.1) para as funções da base, obtem-se:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} \hat{C}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})[e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y)]\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \qquad \text{(III.3)}$$

A expansão (III.3) acima pode ainda ser escrita como:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y)\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \qquad \text{(III.4)}$$

onde, $\hat{D}_n = (\hat{C}_n^*)^+$, isto é, o adjunto do complexo conjugado de $\hat{C}_n$.

Aplicando o operador de translação (II.37) a $\psi(\vec{r},t)$, dado por (III.4) temos:

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{\nabla}\vec{A}.\vec{r})} \sum_{n\vec{k}\ell} e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y)\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \qquad \text{(III.5)}$$

que resulta em (veja Apêndice A):

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = \sum_{nk\ell} e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y)[e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)}]\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \tag{III.6}$$

onde,

$$\vec{K}_0 = k_x\vec{e}_x + k_z\vec{e}_z + (e/\hbar c)\vec{\nabla}\vec{A}.i\vec{\nabla}_{\vec{k}}$$

$$= k_x\vec{e}_x + (-i/\lambda)\frac{\partial}{\partial k_x}\vec{e}_y + k_z\vec{e}_z \tag{III.7}$$

Como $T(\vec{R})\psi(\vec{r},t)$ também é uma autofunção de H, com o mesmo autovalor, nós podemos escreve-la em analogia com (III.4) (veja apêndice C)

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y)\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi'_n(\vec{k},t) \tag{III.8}$$

Da propriedade translacional resulta que (III.6) e (III.8) devem ter a mesma forma, isto é:

$$e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) = \hat{D}_n(\vec{k},\vec{B};\vec{r})\psi'_{n\ell}(\vec{k},t) \tag{III.9}$$

A igualdade (III.9) exige que $\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})$ seja uma função periódica de $\vec{r}$, dada a presença do operador de translação $e^{i\vec{R}.\vec{p}}$ no operador $e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)}$. Quanto ao operador $e^{i\vec{R}.\hbar\vec{K}_0}$, desde que ele não age sobre as coordenadas $\vec{r}$, a igualdade pode ser satisfeita se $\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})$ comuta com ele. E isso é possível se $\hat{D}_n$, por exemplo, for função de um operador $\vec{K}$ que comute com $\vec{K}_0$. Um tal operador é:

$$\vec{K} = k_y\vec{e}_y + k_z\vec{e}_z + (e/\hbar c)i\vec{\nabla}_{\vec{k}}.\vec{\nabla}\vec{A}$$

$$= (-i/\lambda)\frac{\partial}{\partial k_y}\vec{e}_x + k_y\vec{e}_y + k_z e_z \tag{III.10}$$

Aqui, os operadores $\vec{K}_0$ e $\vec{K}$ diferem daqueles obtidos por Misxa, pela ausência dos termos $k_y\vec{e}_y$ e $k_x\vec{e}_x$, respectivamente. Suas relações de comutação, contudo, são idênticas à anteriores.

Encontramos, até aqui, as condições necessárias para a completeza das funções $\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r})$. Nesse ponto, vamos efetuar uma escolha para as dependências funcionais do operador $\bar{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})$. Se fazemos,

$$\bar{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r}) = U_{n\vec{K}}(\vec{r}) \tag{III.11}$$

onde $U_{n\vec{K}}(\vec{r})$ é o operador obtido de $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$ substituindo-se $\vec{k}$ por $\vec{K}$ de maneira simétrica, as condições acima exigidas são preenchidas. A forma simétrica de $U_{n\vec{k}}(\vec{r})$ é obtida, como antes, a partir da expansão em termos das funções de Wannier,

$$A_n(\vec{r} - \vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}.\vec{R}} \psi_n(\vec{k},\vec{r}) \tag{III.12}$$

da parte periódica da função de Bloch:

$$U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} A_n(\vec{r} - \vec{R}) e^{i(\vec{R} - \vec{r}).\vec{k}} \tag{III.13}$$

onde a substituição simétrica de $\vec{k}$ por $\vec{K}$, nos deixa:

$$U_{n\vec{K}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} A_n(\vec{r} - \vec{R}) e^{i(\vec{R} - \vec{r}).\vec{K}} \tag{III.14}$$

Novamente, como qualquer função simétrica $F(\vec{K})$ pode ser expandida como

$$F(\vec{K}) = \int d\vec{\rho}\; e^{-i\vec{K}.\vec{\rho}} F(\vec{\rho}) \tag{III.15}$$

resulta que

$$C_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r}) = U_{n\vec{K}*}(\vec{r}) \qquad \text{(III.16)}$$

Assim sendo,as funções básicas para o problema tem a forma seguinte:

$$\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r}) = U_{n\vec{K}*}(\vec{r}) \left[e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k,\vec{B},y) \right] \qquad \text{(III.17)}$$

No limite da rede vazia, $V(\vec{r}) \to 0$, temos que $U_{n\vec{K}*}(\vec{r})$ é uma constante e, então:

$$\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r}) \to e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y) \qquad \text{(III.18)}$$

que é a solução do eletrom livre num campo magnético uniforme para um hamiltoniano no calibre linear.

No limite $\vec{B} \to 0$, entretanto, a função acima, embora apresente algumas propriedades das funções de Bloch para $\vec{B}=0$, solução do problema, ela não reproduz exatamente uma dessas funções. Isso porque, enquanto a função de Landau - parte entre colchetes - em (III.17) - nesse limite, deve reproduzir a função de onda de um eletrom livre, isto é, uma onda plana, a parte inicial em (III.17) nos dá a parte periódica da função de Bloch, mas no plano $k_x=0$, pois, quando $\vec{B}=0$ temos que $\vec{K} = k_y\vec{e}_y + k_z\vec{e}_z$. Deste modo, a função base seria o produto de uma onda plana pela parte periódica da funçaõ de Bloch calculada com $k_x=0$.

III.3 - Prova da Completeza desse conjunto de funções:

Esta prova pode ser feita de modo completamente análogo ao apresentado na Seção II.4, para o conjunto de funções de Roth. Mostraremos que a escolha $C_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r}) = U_{n\vec{K}*}(\vec{r})$ é condição suficiente para a completeza do conjunto.

Para isso, supomos que o conjunto das $\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r})$ não é completo e, então, reunimos a ele, outro conjunto de funções de forma semelhante:

$$X_{m\vec{k}\ell}(\vec{r}) = \hat{F}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\, e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y) \qquad \text{(III.19)}$$

tal que o conjunto reunião seja completo. Seguindo o procedimento anterior escrevemos:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y) U_{n\vec{K}}(\vec{r}) \psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y) \hat{G}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r}) \psi_{n\ell}(\vec{k},t) \qquad \text{(III.20)}$$

onde $\hat{G}_m = (\hat{F}^*_m)^+$. Aplicando o operador magnético de translação (II.37), à $\psi(\vec{r},t)$ dada por (III.20), isto é:

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{\nabla}\vec{A}.\vec{r})} \sum_{n\vec{k}\ell} e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y) U_{n\vec{K}}(\vec{r}) \psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\nabla A.\vec{r})} \sum_{n\vec{k}\ell} e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y) \hat{G}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r}) \psi_{m\ell}(\vec{k},t)$$

$$\text{(III.21)}$$

encontramos:

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y)[e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)}] U_{n\vec{K}}(\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y)[e^{i\vec{R}:(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)}]\hat{G}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{m\ell}(\vec{k},t) \qquad \text{(III.22)}$$

Novamente, com um raciocínio idêntico ao dar Seção III.4, pode-se mostrar que $\hat{G}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r})$ deve na função periódica de r, bem como -- função simétrica de $\vec{K}$. Para obter um operador simétrico em $\vec{K}$, - procedemos como antes ficando justificada a expansão:

$$\hat{G}_m(\vec{k},\vec{r}) = \sum_n a_{nm} U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$$

com os coeficientes a_{nm} independentes de $\vec{k}$. Temos daí,

$$\hat{G}_m(\vec{K}^*,\vec{r}) = \sum_n a_{nm} U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$$

onde a forma simétrica em $\vec{K}^*$ de $U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$ é obtida do modo já descrito. Entretanto como para qualquer função simétrica de $\vec{K}$, a relação (II.46) é válida, obtemos:

$$[\hat{G}_m^+(\vec{K})]^* \doteq \hat{G}_m(\vec{K}^*) = \hat{F}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r})$$

donde

$$\hat{F}_m(\vec{k},\vec{B},\vec{r}) = \sum_n a_{nm} U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$$

e,portanto,

$$X_{m\vec{k}\ell}(\vec{r}) = \sum_n a_{nm}\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r}) \qquad \text{(III.23)}$$

Dessa forma, qualquer função do conjunto das $X_{m\vec{k}\ell}(\vec{r})$ pode ser escrita como uma combinação linear das funções $\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r})$. Portanto, as funções $X_{m\vec{k}\ell}(\vec{r})$ não são independentes, donde se conclui que o conjunto das $\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r})$ é completo, com respeito à função de onda do Hamiltoniano de um eletron de Bloch num campo magnético uniforme.

CAPÍTULO IV

HAMILTONIANO EFETIVO

Vamos aqui derivar um hamiltoniano efetivo, a partir das funções básicas $\phi_{n,\vec{k},\ell}(\vec{r})$, obtidas no capítulo anterior. É interessante observar que no operador $U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$ diferencia com relação à k_y e que a função do eletron livre de Landau, que o segue em (III.17), não contém k_y. Esse é um aspecto importante dessas funções básicas. Elas, apesar disso, continuam bem definidas, como pode ser observado, da expansão de $U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$ em termos das funções de Wannier. Assim procedendo, temos:

$$U_{n\vec{K}^*}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} A_n(\vec{r}-\vec{R})\, e^{i(\vec{R}-\vec{r}).\vec{K}^*} \qquad \text{(IV.1)}$$

Com o uso da identidade

$$e^{E+F} = e^{F}\, e^{E}\, e^{\frac{1}{2}[E,F]_-}$$

que é válida desde que $[E,F]_-$ comute com E e F - o que é verdadeiro no caso acima - e definindo E e F como sendo, respectivamente:

$$E = i(\vec{R}-\vec{r}).\, \frac{ieB}{\hbar c}\, \frac{\partial}{\partial ky}\, \vec{e}_x$$

$$F = i(\vec{R}-\vec{r}).(k_y\vec{e}_y + k_z\vec{e}_z)$$

donde

$$[E,F]_- = \frac{ieB}{2\hbar c}(\vec{R}-\vec{r}).\vec{\nabla}\vec{A}.(\vec{R}-\vec{r})$$

obtemos:

$$U_{n\vec{K}*}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} A_n(\vec{r} - \vec{R})e^{i(\vec{R} - \vec{r}).(k_y\vec{e}_y + k_z\vec{e}_z)} e^{i(\vec{R} - \vec{r}).\frac{ieB}{\hbar c}\frac{\partial}{\partial k_y}\vec{e}_x} \times$$

$$\times\ e^{\frac{ieB}{2\hbar c}(\vec{R} - \vec{r}).\ \vec{\nabla}\vec{A}.(\vec{R} - \vec{r})} \qquad \text{(IV.2)}$$

Considerando a expansão em série de potências do operador dado pela segunda exponencial na expansão (IV.2), isto é:

$$e^{i(\vec{R}-\vec{r}).\frac{ieB}{\hbar c}\frac{\partial}{\partial k_y}\vec{e}_x} = \sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{j!}\left[i(\vec{R}-\vec{r}).\frac{ieB}{\hbar c}\frac{\partial}{\partial k_y}\vec{e}_x\right]^j \qquad \text{(IV.3)}$$

podemos observar que somente o termo constante (1º termo) da expansão nos interessa. O operador $U_{n\vec{K}*}(\vec{r})$ pode ser, então, escrito como

$$U_{n\vec{K}*}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} A_n(\vec{r}-\vec{R})e^{i(\vec{R}-\vec{r}).(k_y\vec{e}_y + k_z\vec{e}_z)} e^{\frac{ieB}{2\hbar c}(\vec{R}-\vec{r}).\vec{\nabla}\vec{A}.(\vec{R}-\vec{r})} \qquad \text{(IV.4)}$$

Portanto, as funções $\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r})$ podem ser escritas como o produto de $U_{n\vec{K}*}(\vec{r})$ por $e^{i(k_x x + k_z z)}P_\ell(k_x,\vec{B},y)$, sendo este último fator representado, no que se segue, por L_ℓ, isto é:

$$\phi_{n\vec{h}\ell}(\vec{r}) = U_{n\vec{K}*}(\vec{r})L_\ell \qquad \text{(IV.5)}$$

onde, portanto, L_ℓ designa a função de Landau.

Consideremos a ação do operador Hamiltoniano (II.1) sobre as $\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r})$ dadas por (IV.5). Para isso é conveniente escrevê-lo em termos das componentes dos operadores vetoriais $\vec{p}$ e $\vec{A}(\vec{r})$, ou seja:

$$H = \frac{1}{2m}\left[\sum_{i=1}^{3} p_{x_i}^2 + \frac{e^2}{c^2}A_{x_i}(\vec{r}) + \frac{e}{c}p_{x_i}A_{x_i}(\vec{r}) + \frac{e}{c}A_{x_i}(\vec{r})p_{x_i}\right] + V(\vec{r})$$

$$\text{(IV.6)}$$

Obtemos:

$$H\phi_{n\vec{K}\ell}(\vec{r}) = \frac{1}{2m}\Bigg\{\sum_{i=1}^{3}\Big[2(p_{x_i}U_{n\vec{K}^*}(\vec{r}))(p_{x_i}L_\ell) + U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})p_{x_i}^2L_\ell +$$

$$L_\ell(p_{x_i}^2U_{n\vec{K}*}(\vec{r})) + \frac{e^2}{c^2}A_{x_i}^2(U_{n\vec{K}*}L_\ell) + \frac{e}{c}(p_{x_i}A_{x_i})(U_{n\vec{K}*}L_\ell) +$$

$$2\frac{e}{c}A_{x_i}(p_{x_i}U_{n\vec{K}*}(\vec{r}))L_\ell + 2\frac{e}{c}A_{x_i}U_{n\vec{K}*}(\vec{r})(p_{x_i}L_\ell)\Big]\Bigg\} + V(\vec{r})(U_{n\vec{K}*}(\vec{r})L_\ell) \quad (IV.7)$$

Agrupando termos encontramos:

$$H\phi_{n\vec{K}\ell}(\vec{r}) = U_{n\vec{K}}*(\vec{r})\frac{1}{2m}\left[p + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})\right]^2L_\ell + L_\ell\left[\frac{1}{2m}\vec{p}^2 + V(\vec{r})\right]U_{n\vec{K}}*(\vec{r}) +$$

$$+ \frac{1}{m}\frac{e}{c}L_\ell(\vec{A}(\vec{r}).\vec{p})\,U_{n\vec{K}*}(\vec{r}) + \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{3}(p_{x_i}L_\ell)(p_{x_i}U_{n\vec{K}*}(\vec{r})) \quad (IV.8)$$

A expressão (IV.8) acima pode ainda ser escrita como:

$$H\phi_{n\vec{K}\ell}(\vec{r}) = E_{k_z,\ell}\,U_{n\vec{K}*}L_\ell + L_\ell\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 - \frac{i\hbar^2}{m}\vec{K}^*\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}} + V(\vec{r})\right]U_{n\vec{K}*}(\vec{r}) +$$

$$L_\ell\left[-\frac{ieB}{mc}y + \frac{i\hbar k_x}{m} - \frac{\hbar k_y}{m}\right]p_yU_{n\vec{K}}*(\vec{r}) + L_\ell\left[\frac{-eB}{mc}y + \frac{\hbar k_x}{m} - \frac{ieB}{mc}\frac{\partial}{\partial k_y}\right]\times$$

$$\times p_xU_{n\vec{K}*}(\vec{r}) + L_{\ell+1}\frac{i\hbar}{m}\left(\frac{eB}{\hbar c}\right)^{1/2}p_yU_{n\vec{K}*}(\vec{r}) \quad (IV.9)$$

O termo

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 - \frac{i\hbar^2}{m}\vec{K}^*\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}} + V(\vec{r})\right]U_{n\vec{K}*}(\vec{r})$$

em (IV.9) pode, desde que os operadores $\vec{K}^*.\ \vec{\nabla}_{\vec{r}}$ e $\vec{K}^*.\vec{K}^*$ são simétri-nas componentes de K*, ser substituido por,

$$\left[E_n(\vec{K}^*) - \frac{\hbar^2}{2m}\vec{K}^*.\ \vec{K}^*\right] U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$$

que é gerado de

$$\left[E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}.\vec{k}\right] U_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2_{\vec{r}} - \frac{i\hbar^2}{2m}\vec{k}.\vec{\nabla}_{\vec{r}} + V(\vec{r})\right] U_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

substituindo-se $\vec{k}$ por $\vec{K}^*$, simetricamente. Em $E_n(\vec{k})$ a substituição é feita no expoente da sua série de Fourier,

$$E_n(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}} \epsilon_n(\vec{R})_\ell^{\,-i\vec{R}.\vec{k}}$$

Ficamos, então, com:

$$H\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r}) = \left[E_{k_z,\ell} + E_n(\vec{K}^*) - \frac{h^2}{2m}\vec{K}^*.\vec{K}^*\right] U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})L_\ell +$$

$$L_{\ell+1}\frac{i\hbar}{m}\left(\frac{eB}{\hbar c}\right)^{1/2} p_y U_{n\vec{K}^*}(\vec{r}) + L_\ell\left[-\frac{ieB}{mc}y + \frac{i\hbar k_x}{m} - \frac{\hbar\ k_y}{m}\right]p_y U_{n\vec{K}^*}(\vec{r}) +$$

$$L_\ell\left[-\frac{eB}{mc}y + \frac{\hbar k_x}{m} - \frac{ieB}{mc}\frac{\partial}{\partial k_y}\right]p_x U_{n\vec{K}^*}(\vec{r}) \qquad \text{(IV.10)}$$

Como era de esperar, no limite da rede vazia, a expressão de $H\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r})$ se reduz à,

$$H\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r}) = E_{k_z,\ell}\,\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r}) \qquad \text{(IV.11)}$$

onde $E_{k_z,\ell}$ são as energias dos níveis de Landau. Isso porque, quando $V(\vec{r}) \to 0$, as derivadas $\frac{\partial}{\partial x} U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$ e $\frac{\partial}{\partial y} U_{n\vec{K}^*}(\vec{r})$ devem se anular, e a "banda" de energias $E_n(\vec{K}^*)$ torna-se: $\frac{\hbar^2}{2m} \vec{K}^*.\vec{K}^*$

Podemos, ainda, escrever (IV.10) na forma de uma série de potências em B, isto é :

$$H\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r}) = \Bigg\{ E_{k_z,\ell} + E_n(\vec{K}^*) - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{K}^*.\vec{K}^*$$

$$+ \frac{i\hbar^2}{m} k_x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar^2}{m} k_x + \frac{i\hbar^2}{m} k_y \frac{\partial}{\partial k_y} +$$

$$+\frac{\hbar}{m}\left(\frac{eB}{c}\right)\left[ik_x \frac{\partial}{\partial k_y} + iy \frac{\partial}{\partial x} + yk_x + \frac{\partial}{\partial k_x} \frac{\partial}{\partial_y} - ix\frac{\partial}{\partial y} + ik_y \frac{\partial}{\partial k_x} + xk_y\right]$$

$$+ \frac{1}{m}\left(\frac{eB}{c}\right)^2 \left[\frac{\partial}{\partial k_x} - ix\right]^2 \Bigg\} \phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r}) \qquad \text{(IV.12)}$$

obtendo-se, finalmente, a expressão para a aplicação do Hamiltoniano H sobre as funções de base.

-CAPÍTULO V-

CONCLUSÕES

Neste trabalho mostramos ser possível construir um conjunto completo de funcões que, no limite da rede vazia, isto é, o potencial cristalino $V(\vec{r})$ tendendo a zero, produzem as funcões de Landau, auto-funcões, naquele limite, do Hamiltoniano H de um eletron de Bloch num campo magnético uniforme $\vec{B}$. Essas funções, entretanto, no limite $\vec{B} \to 0$, não reproduzem exatamente as funções de Bloch, autofunções de H nesse caso, mas são o produto de uma onda plana por uma função periódica na rede real com $k_x = 0$.

Já as funcões de Roth normalmente utilizadas na bibliografia, embora apresentem o desejado comportamento no limite $\vec{B} \to 0$, tendem as ondas planas, quando $V(\vec{r}) \to 0$.

Assim sendo, esperamos que as funções aqui introduzidas sejam a escolha natural no estudo de eletrons de condução de metais sob a ação de campos magnéticos intensos, pois nesse caso, elas apresentam o comportamento esperado. Como as funções de Roth se assemelham mais a onda planas nesse caso, será necessário um grande número delas para bem caracterizar o estado, o que significa que a dimensão da matriz secular a ser diagonalizada pode-se tornar muito grande.

Estabelecemos, também, o Hamiltoniano efetivo para essas funções, o qual pode ser colocado numa série de potências de $\vec{B}$.

Não tentamos, entretanto, aplicar o formalismo desenvolvido a um caso concreto, o que será feito proximamente

Finalmente, seria interessante comentar que das várias funções tentativas introduzidas - o que nos consumiu grande parte do trabalho - as apresentadas neste trabalho foram as únicas que apre -

sentaram o comportamento desejado. Deixamos, também, de comentar outros trabalhos que tratam do estudo de um eletron de Bloch num campo magnético, pois a bibliografia era muito extensa e por não estarem eles diretamente ligados ao nosso trabalho.

APÊNDICE A

Derivação da expressão,

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y)] e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)} \bar{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t)$$

Consideremos o operador de translação magnético aplicado à função de onda, na sua forma de expansão em série de potências. Isso nos dá:

$$\sum_j \frac{1}{j!}[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\nabla A.\vec{r})]^j \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_\ell(k_x,\vec{B},y) e^{-ik_y y}] \bar{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \tag{A.1}$$

Aplicando inicialmente, o têrmo linear da expansão (j=1) ficamos - com:

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\nabla A.\vec{r})] \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_\ell(k_x,\vec{B},y) e^{-ik_y y}] \bar{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) =$$

$$= \sum_{n\vec{k}\ell} [(\hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}) P_\ell(k_x,\vec{B},y) e^{-ik_y y}] \bar{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_\ell(k_x,\vec{B},y) e^{-ik_y y}] \hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}} \bar{D}_n(\vec{k};\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} (h\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}} P_\ell(k_x,\vec{B},\vec{r}) e^{-ik_y y})] \bar{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} [i\vec{R}.\frac{e}{c}\nabla A.\vec{r} e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_\ell(k_x,\vec{B},y) e^{-ik_y y}] \bar{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \tag{A.2}$$

Mas como,

$$\vec{r}\, e^{i\vec{k}.\vec{r}} = -i\vec{\nabla}_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

a relação (A.2) fica:

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\,\nabla A.\vec{r})] \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}]\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) =$$

$$= \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}]\hbar\vec{R}.\vec{k}\bar{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}]\hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} (\hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}}\, P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y})]\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} [i\vec{R}.\frac{e}{c}\,\nabla A.(-i\vec{\nabla}_{\vec{k}})(e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y})]\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) -$$

$$- \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}}\, i\vec{R}.\frac{e}{c}\,\nabla A.(-i\vec{\nabla}_{\vec{k}})(P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y})]\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \qquad (A.3)$$

O terceiro e o quinto termos do segundo membro da Eq.(A.3'), podem - ser reescritos, respectivamente, como:

$$\sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} (\hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}}\, P_\ell(k_x,\vec{B},y))e^{-ik_y y}]\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_\ell(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}]\hbar\vec{R}.(-ik_y)\vec{e}_y\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t)$$

e

$$\sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} (i\vec{R}.\frac{e}{c}\,\nabla A.(-i\vec{\nabla}_{\vec{k}})P_\ell(k_x,\vec{B},y))e^{-ik_y y}]\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t)$$

Esta última expressão é obtida, tendo em vista que o operador - $i\vec{R}.\frac{e}{c}\,\nabla A.(-i\vec{\nabla}_{\vec{k}})$ só contém derivação com respeito a k_x. Pode-se, entretanto, mostrar que esse termo é cancelado pela primeira parcela da expressão do terceiro termo. Para ver isso, calculemos

$$[\hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}} + i\vec{R}.\frac{e}{c}\,\nabla A.(-i\vec{\nabla}_{\vec{k}})]P_\ell(k_x,\vec{B},y)$$

Como

$$\nabla A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

então

$$[\hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}} - \vec{R}.\frac{e}{c}\,\nabla A.\vec{\nabla}_{\vec{k}}]P_\ell(k\ ,\vec{B},y) = \vec{R}.[\vec{e}_y(\frac{\hbar\partial}{\partial y} - \frac{e}{c}\,B\frac{\partial}{\partial k_x})]P_\ell(k_x,\vec{B},y) \qquad (A.4)$$

Mas, as dependências funcionais de $P_\ell(k_x,\vec{B},y)$ em k_x e y diferem apenas por uma constante multiplicativa. É fácil mostrar que

$$\frac{\partial}{\partial y}\, P_\ell(k_x,\vec{B},y) = \frac{\partial f}{\partial y}\, G(k_x,\vec{B},y) = \lambda^{-1/2}\, G(k_x,\vec{B},y) \qquad (A.5a)$$

$$\frac{\partial}{\partial k_x} P_\ell(k_x,\vec{B},y) = \frac{\partial f}{\partial k_x} G(k_x,\vec{B},y) = -\lambda^{1/2} G(k_x,\vec{B},y) \qquad (A.5\,b)$$

donde

$$\frac{\partial}{\partial y} P_\ell(k_x,\vec{B},y) = -\lambda \frac{\partial}{\partial k_x} P_\ell(k_x,\vec{B},y) \qquad (A.6)$$

Logo,

$$\vec{R}.[\vec{e}_y(\hbar\frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} B \frac{\partial}{\partial kx}) P_\ell(k_x;\vec{B},y)] = 0 \qquad (A.7)$$

Este último resultado e mais o fato de que o operador $i\vec{\nabla}_{\vec{k}}$ é hermitiano, permite uma rearrumação dos termos restantes sob um único somatório, na forma seguinte

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c} \nabla A.\vec{r})]\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{ik.r} P_\ell(k_x,B,y)e^{-ik_y y}] \, x$$

$$x \, [\hbar\vec{R}.i(k_x\vec{e}_x + k_z\vec{e}_z) + \hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}} + i\vec{R}.\frac{e}{c} \nabla A.i\vec{\nabla}_{\vec{k}}]\bar{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \qquad (A.8)$$

ou

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c} \nabla A.\vec{r})]\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i(k_x x + k_z z)} P_\ell(k_x,\vec{B},y)] \, x$$

$$x \, |i\vec{R}.(\vec{p} + h\vec{K}_0)|\bar{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \qquad (A.9)$$

Para retornar à forma exponencial, vamos recorrer a um processo de indução. Assim pois, suponhamos que

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\ \nabla A.\vec{r})]^{j} \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}]\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) =$$

$$= \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}][i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)]^{j}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \qquad (A.10)$$

Daí,

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\ \nabla A.\vec{r})]^{j+1} \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}]\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) =$$

$$= [i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\ \nabla A.\vec{r})] \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}]\ x$$

$$x\ [i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)]^{j}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \qquad (A.11)$$

Fazendo,

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)]^{j}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) = \hat{X}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \qquad (A.12)$$

ficamos com:

$$\sum_{n\vec{k}\ell} |(h\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}}\ e^{i\vec{k}.\vec{r}})P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}]\hat{X}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}]\hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}}\hat{X}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}}\ \hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}}(P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y})]\hat{X}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} [i\vec{R}.\frac{e}{c}\ \nabla A.(-i\vec{\nabla}_{\vec{k}})(e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y})]\hat{X}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} i\vec{R}.\frac{e}{c} \nabla A.(-i\vec{\nabla}_{\vec{k}})(P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y})]\hat{X}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t)$$

Todos os argumentos anteriores valem aqui então:

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c} \nabla A.\vec{r})]^{j+1}\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} |e^{\vec{ik}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}| \quad x$$

$$x \; [i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)]\hat{X}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) =$$

$$= \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i\vec{k}.\vec{r}} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)e^{-ik_y y}][i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)]^{j+1}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \tag{A.13}$$

donde, finalmente,

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} [e^{i(k_x x + k_y y)} P_{\ell}(k_x,\vec{B},y)]e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)} \quad x$$

$$x \quad \hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_{n\ell}(\vec{k},t) \tag{A.14}$$

Como queríamos demonstrar.

APÊNDICE B

Tomando $T(\vec{R})$ na forma de uma série de potências, temos:

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = \sum_j \frac{1}{j!}\,[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\,\vec{\nabla}\vec{A}.\vec{r})]^j \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) \qquad (B.1)$$

Aplicando o têrmo linear da expansão ficamos com:

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\,\vec{\nabla}\vec{A}.\vec{r})] \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) =$$

$$= \hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) + \frac{ie}{c}\,\vec{R}.\vec{\nabla}\vec{A}.\vec{r} \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t)$$

$$(B.2)$$

como

$$\vec{r}\sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} = (-i\vec{\nabla}_{\vec{k}})\sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

e como o operador $i\vec{\nabla}_{\vec{k}}$ é hermiteano, o segundo têrmo da relação (B.2) pode ser reescrito do seguinte modo:

$$\sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}(i\hbar\vec{R}.\vec{k})\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) + e^{i\vec{k}.\vec{r}}(\hbar\vec{R}.\vec{\nabla}_{\vec{r}})\hat{D}_n\psi_n(\vec{k},t) \quad +$$

$$+ \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}(\frac{ie}{c}\,\vec{R}.\vec{\nabla}\vec{A}.i\vec{\nabla}_{\vec{k}})\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t)$$

utilizando a definição (II.42) de $\vec{K}_0$ podemos escrever o têrmo acima como:

$$\sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} [i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)]\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t)$$

Para se retornar à forma exponencial, recorre-se à indução, isto é, supõe-se que o resultado acima é válido para a j-ésima potência do termo linear e prova-se, daí, a validade para a potência j+1. Assim sendo supõe-se que

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\,\vec{\nabla}\vec{A}.\vec{r})]^j \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) =$$

$$= \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} [i\vec{R}(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)]^j\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) \tag{B.3}$$

é válido. Denominando

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)]^j\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) = \hat{X}_n\psi_n(k,t)$$

resulta

$$[i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\,\vec{\nabla}\vec{A}.\vec{r})]^{j+1} \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) =$$

$$= [i\vec{R}.(\vec{p} + \frac{e}{c}\,\vec{\nabla}\vec{A}.\vec{r})] \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}\hat{X}_n\psi_n(\vec{k},t) \tag{B.4}$$

Aplicando os argumentos apresentados anteriormente, o segundo membro de (B.4) pode ser escrito

$$\sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} [i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)]\hat{X}_n\psi_n(\vec{k},t) = \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} [i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)]^{j+1}\hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},$$

donde finalmente

$$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}} e^{i\vec{R}.(\vec{p} + \hbar\vec{K}_0)} \hat{D}_n(\vec{k},\vec{B},\vec{r})\psi_n(\vec{k},t) \qquad (B.5)$$

APÊNDICE C

$T(\vec{R})\psi(\vec{r},t)$ também é autofunção de H com o mesmo autovalor. Se o autovalor é não degenerado, $T(\vec{R})\psi(\vec{r},t)$ é simplesmente proporcional à $\psi(\vec{r},t)$. Se é degenerado, $T(\vec{R})\psi(\vec{r},t)$ será uma combinação linear das autofunções com esse autovalor. Assim,

$$T(\vec{R})\psi_j(\vec{r},t) = \sum_m a_m^j \psi_m(\vec{r},t) \tag{C.1}$$

Como cada uma das $\psi_m(\vec{r},t)$ pode ser escrita em têrmos das $\phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r})$, isto é

$$T(\vec{R})\psi_j(\vec{r},t) = \sum_m a_m^j \sum_{n\vec{k}\ell} \phi_{n\vec{k}\ell}(\vec{r})\psi_{m\ell}(\vec{k},t)$$

$$= \sum_{n\vec{k}\ell} \phi_{nk\ell}[\sum_m a_m^j \psi_{nm}(\vec{k},t)]$$

então

$$T(\vec{R})\psi_j(\vec{r},t) = \sum_{n\vec{k}\ell} \phi_{n\vec{k}\ell}\psi'_{n\ell}(\vec{k},t) = \psi'_j(\vec{r},t) \tag{C.2}$$

APÊNDICE D

Quando construímos um operador a partir de uma função, devemos observar que o operador obtido seja bem definido, onde por - um operador bem definido deve-se entender um operador que não contenha, nas suas dependências funcionais, quaisquer ambiguidades acerca da ordem em que aparecem, nos produtos que porventura ocorram, as componentes que não comutam dos operadores vetoriais envolvidos.

Se tomamos a função na sua expansão de Fourier,

$$H(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}} H(\vec{R}) e^{-i\vec{R}.\vec{k}} \tag{D.1}$$

e substituimos $\vec{k}$ pelo operador vetorial $\vec{K}^*$, obtemos:

$$H(\vec{K}^*) = \sum_{\vec{R}} H(\vec{R}) e^{-i\vec{R}.\vec{K}^*} \tag{D.2}$$

Considerando agora, o operador exponencial na forma de uma série - de potências, temos:

$$e^{-i\vec{R}.\vec{K}^*} = \sum_j \frac{(-i)^j}{j!}[\vec{R}.\vec{K}^*]^j = \sum_j \frac{(-i)^j}{j!}[R_x K_x^* + R_y K_y^* + R_z K_z^*]^j \tag{D.3}$$

Pode-se mostrar que qualquer têrmo dessa soma é completamente simetrizado, isto é, se ocorre um produto, ocorre também o produto com fatores na ordem inversa. Assim, a substituição na exponencial evita qualquer ambiguidade. Isso é facilmente observado para os - têrmos de ordem baixa. Por exemplo, para j=2, (só interessam as - componentes K_x^* e K_y^* no nosso caso, que não comutam).

$$(K_x^* + K_y^*)^2 = K_x^{*2} + K_x^* K_y^* + K_y^* K_x^* + K_y^{*2} \tag{D.4}$$

Portanto, a substituição de k por K* na exponencial gera uma função simétrica do operador. Segue daí que qualquer função simétrica de um operador pode ser escrita na forma transformada de Fourier como usamos no texto:

$$f(\vec{K}^*) = \int d\vec{\rho}\, e^{-i\vec{\rho}.\vec{K}^*} f(\vec{\rho}) \qquad (D.5)$$

B I B L I O G R A F I A

1. L.Landau, Z.Phys. 64, 629 (1930)
   L.D.Landau et E.M.Lifchitz, Mécanique Quantique, Editions Mir, Moscou 1966.
2. J.M.Luttinger, Phys.Rev. 84, 814 (1951)
3. R.Peierls, Z. Phys. 80, 763 (1933)
4. J.M.Linttinger and W.Kohn, Phys. Rev. 97, 869 (1955)
5. E.O.Kane. The $\vec{k}.\vec{p}$ Method. In "Semiconductors and Semi Metals" (R.K.Willardson and A.C.Beer, eds.), vol. 1, p. 75. Academic Press, New York.
6. G.H.Wannier and D.R.Fredkin, Phys. Rev. 125, 1910 (1962)
7. L.M.Roth, J.Phys.Chem. Solids 23, 433, (1962)
8. E.Brown, Phys. Rev. 133 A 1038 (1964)
   E.Brown. Aspects of Group Theory in Electron Dynamics, Solid State Physics 22, 313 (1968).
9. P.K.Misra, Phys.Rev. B 2, nº 10, 3906 (1970)
10. P.K.Misra, Physics Letters 33 A , nº 6, 339 (1970)
11. W.Kohn, Phys. Rev. 115, nº 6, 1460 (1959)