

# Sobre potenciais periódicos no reticulado cúbico simples

On periodic potentials on simple cubic lattice

Everton Artuso<sup>\*1</sup>, Cesar Marim<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal da Fronteira Sul, Campus Realeza, PR, Brasil

Recebido em 25 de maio de 2020. Revisado em 30 de junho de 2020. Aceito em 09 de julho de 2020.

O presente texto trata-se de uma adaptação simples da caracterização via séries de Fourier de uma classe de potenciais periódicos para o reticulado cúbico simples, desenvolvida originalmente no reticulado colméia, tratando com rigor tanto as propriedades do tipo de potencial quanto as propriedades da natureza do espaço reticulado.

**Palavras-chave:** Potencial periódico, reticulado colméia, reticulado cúbico simples.

This text is a simple adaptation of the characterization via Fourier series of a class of periodic potentials to the simple cubic lattice, originally developed in the honeycomb lattice, rigorously treating both the potential type properties and the nature properties of the lattice space.

**Keywords:** Periodic potential, honeycomb lattice, simple cubic lattice.

## 1. Introdução

A física da matéria condensada de um elétron é uma simplificação que tem tido um sucesso notável na descrição de certas propriedades dos cristais. As noções básicas de materiais isolantes, condutores e semi-condutores podem ser explicadas pelo espectro de energia de um único elétron que se move sob a influência de um arranjo periódico de átomos e do princípio de exclusão de Pauli [1]. O último determina a ocupação dos estados por elétrons não interagentes. No modelo de um elétron, a interação entre os elétrons é negligenciada e as propriedades espectrais e de transporte do material são descritas pelo modelo de uma partícula do operador Hamiltoniano de Schrödinger.

De fato, em condutores e semi-condutores, elétrons livres têm que partilhar o espaço total disponível no interior do material - e por isso seus níveis de energia se empilham criando uma estrutura de bandas a partir de cada nível de energia atômico. Em bons condutores (metais) os elétrons estão tão fortemente degenerados que eles acabam por não contribuir de forma significativa para a capacidade térmica do metal. Muitas propriedades mecânicas, elétricas, magnéticas, ópticas e químicas dos sólidos são consequências diretas da repulsão de Pauli entre elétrons livres ou semi-livres. Para mais detalhes, veja [1] e [2].

Descrevendo a evolução temporal do elétron, a equação de Erwin Schrödinger *dependente do tempo* é dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(t, x) + V(x) \Psi(t, x), \quad (1)$$

onde  $t$  é a variável temporal,  $x$  é a variável espacial e  $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05457 \times 10^{-34} \text{Js}$  é a constante de Planck

dividida por  $2\pi$ . O operador Hamiltoniano  $H$  será, por simplicidade tomando um sistema de unidades adequado para o qual  $m = \frac{1}{2}$  e  $\hbar = 1$ , escrito como

$$H\Psi(t, x) = (-\Delta + V(x))\Psi(t, x). \quad (2)$$

Ainda, é possível reescrever a equação (1) usando o operador  $H$  como sendo  $H\Psi = i\frac{\partial}{\partial t}\Psi$  para o qual o problema de existência e unicidade das soluções da equação (1) com o estado inicial  $\Psi_0 = \Psi(0, \cdot)$  dado podem ser reduzidos ao problema do estabelecimento da auto-adjuncidade para o operador linear  $H$ , ou seja, se o operador for auto-adjunto está garantida a existência e unicidade de soluções com estado inicial  $\Psi_0$ .

Em [3] Fefferman e Weinstein desenvolvem, a partir da teoria de Floquet-Bloch, uma caracterização para o espectro dos operadores de Schrödinger cujo potencial é definido no reticulado colméia. Entre outras coisas, Fefferman e Weinstein constroem uma classe de potenciais periódicos nesse reticulado utilizando algumas ferramentas de mecânica quântica e séries de Fourier. Temos por objetivo adaptar tal construção, enunciada na Proposição 3.2, para um potencial no reticulado cúbico simples (Proposição 4.2). Em outros termos, para  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ , o potencial pode ser escrito como

$$V(x) = \hat{V}(0) + \sum_{j=0}^3 \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} \cos((\tilde{S}^j \mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}), \quad (3)$$

onde  $V_{\mathbf{m}}$  é real,  $\tilde{S}$  é uma ação de  $\mathbb{Z}^3$  dada a partir de uma matriz de rotação em  $\mathbb{R}^3$  e  $\tilde{W}$  é um conjunto de classes de equivalência. Tal resultado é relevante pois ele garante que qualquer potencial assumindo condições necessárias de simetria no reticulado pode ser reescrito de forma muito mais simples como somas de cossenos.

\*Endereço de correspondência: [everton.artuso@uffs.edu.br](mailto:everton.artuso@uffs.edu.br).

## 2. Operadores de Schrödinger Periódicos

Uma vez que íons em um cristal perfeito são ordenados em uma rede periódica regular, podemos considerar o problema de um elétron em um potencial  $V(x)$  com a periodicidade de um *reticulado de Bravais fundamental*, ou seja,  $V(x + v) = V(x)$  para todo vetor  $v$  do *reticulado de Bravais*. Um *reticulado de Bravais* consiste nas configurações básicas que resultam da combinação dos sistemas de cristalização com a disposição das partículas em cada uma das células unitárias de uma estrutura cristalina, sendo estas células entendidas como os paralelepípedos (no caso tridimensional) que constituem a menor subdivisão de uma rede cristalina que conserva as características gerais de todo o reticulado, permitindo que por simples replicação da mesma se possa reconstruir o sólido cristalino completo. Cabe salientar que a periodicidade perfeita é uma idealização e as imperfeições são realmente não desprezíveis, uma vez que, por exemplo, a condutibilidade elétrica dos metais não é infinita. Todavia, modelos são essenciais para a compreensão da natureza e podem, via perturbações refinadas, se aproximar muito das condições físicas reais.

Estamos interessados em examinar propriedades gerais da Equação de Schrödinger, dada por

$$(-\Delta + V(x))\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \tag{4}$$

para um elétron cujo potencial  $V$  é periódico. Elétrons que satisfazem a Equação de Schrödinger com potencial periódico são conhecidos como *elétrons de Bloch* e, conforme [4], estados estacionários de elétrons de Bloch tem a seguinte propriedade como uma consequência geral da periodicidade do potencial  $V$ :

**Teorema 2.1 (de Bloch)** [5] *Os autoestados  $\psi$  do Hamiltoniano (2) podem ser escolhidos de tal forma que, associado a cada  $\psi$ , exista um vetor de onda  $k$  tal que*

$$\psi(x + v) = e^{ik \cdot v} \psi(x) \tag{5}$$

para todo  $v$  no reticulado de Bravais.

Demonstração. Para cada vetor  $v$  do reticulado de Bravais, definimos o operador de translação  $T_v$  o qual, quando operando em qualquer função  $f(x)$  desloca o argumento por  $v$ , ou seja,

$$T_v f(x) = f(x + v).$$

Uma vez que o Hamiltoniano é periódico, temos

$$\begin{aligned} T_v H \psi &= H(x + v) \psi(x + v) \\ &= H(x) \psi(x + v) \\ &= H T_v \psi. \end{aligned} \tag{6}$$

Como (6) vale identicamente para qualquer função  $\psi$ , então  $T_v H = H T_v$ . Além disso, o resultado de aplicarmos

duas translações sucessivas não depende da ordem em que elas foram aplicadas, pois para qualquer  $\psi(x)$  temos

$$T_v T_{v'} \psi(x) = T_{v'} T_v \psi(x) = \psi(x + v + v'), \tag{7}$$

de onde vem

$$T_v T_{v'} = T_{v'} T_v = T_{v+v'}. \tag{8}$$

As equações (6) e (8) nos mostram que os operadores  $T_v$ , para qualquer  $v$  na rede de Bravais, e o Hamiltoniano  $H$  são comutativos, isto é,  $[H, T_v] = 0$  para todo  $v$  na rede de Bravais. Dada  $\psi$  tal que  $H\psi = \varepsilon\psi$ , temos

$$H T_v \psi = T_v H \psi = \varepsilon T_v \psi, \tag{9}$$

logo  $T_v \psi$  é uma autofunção de  $H$  com autovalor  $\varepsilon$ . Uma vez que  $H$  não tem autovalores degenerados, conforme [6], existe uma única autofunção  $\psi$  associada ao autovalor  $\varepsilon$ , logo  $T_v \psi$  é um múltiplo escalar de  $\psi$ , ou seja, existe  $\mu(v) \in \mathbb{R}$  tal que

$$T_v \psi = \mu(v) \psi \tag{10}$$

e  $\psi$  é simultaneamente uma autofunção de  $H$  e  $T_v$ . Os autovalores  $\mu(v)$  dos operadores de translação estão relacionados pela condição (8) que, por um lado nos dá

$$T_{v'} T_v \psi = \mu(v) T_{v'} \psi = \mu(v) \mu(v') \psi, \tag{11}$$

e por outro lado,

$$T_{v'} T_v \psi = T_{v+v'} \psi = \mu(v + v') \psi. \tag{12}$$

De onde vem que os autovalores devem satisfazer

$$\mu(v + v') = \mu(v) \mu(v'). \tag{13}$$

Sejam  $a_i$  os  $d$  vetores primitivos do reticulado de Bravais, onde  $d$  é a dimensão do reticulado. Podemos escrever  $\mu(a_i)$  na forma  $\mu(a_i) = e^{2i\pi\beta_i}$  fazendo uma escolha adequada dos  $\beta_i$ 's. Note que o operador  $T_v$  não é necessariamente auto-adjunto, logo seus autovalores não precisam ser reais. Segue por sucessivas aplicações de (13) que se  $v$  é um vetor qualquer do reticulado de Bravais dado por

$$v = \alpha_1 a_1 + \dots + \alpha_d a_d, \tag{14}$$

então

$$\mu(v) = \mu(a_1)^{\alpha_1} \dots \mu(a_d)^{\alpha_d}, \tag{15}$$

o que é precisamente

$$\mu(v) = e^{ik \cdot v}, \tag{16}$$

onde  $k = \beta_1 b_1 + \dots + \beta_d b_d$  e os  $b_d$ 's são os vetores do reticulado recíproco satisfazendo  $a_i \cdot b_j = 2\pi \delta_{ij}$ . Portanto, conforme [4], mostramos que podemos escolher os autoestados  $\psi$  de  $H$  tais que para todo vetor  $v$  do reticulado de Bravais, vale

$$\psi(x + v) = T_v \psi = \mu(v) \psi = e^{ik \cdot v} \psi(x), \tag{17}$$

precisamente o que queríamos demonstrar.  $\square$

Outras boas referências são [7] e [8].

### 3. Reticulado Colméia

Nos cristais, os átomos ou os núcleos são distribuídos em uma rede periódica (digamos a rede  $\mathbb{Z}^d$  por simplicidade) de uma maneira completamente regular. Conforme [3], vamos assumir que uma partícula (elétron) no ponto  $x \in \mathbb{R}^d$  é estimulada por um potencial da forma  $qf(x - i)$  devido a um átomo (ou íon, ou núcleo) localizado no ponto  $i \in \mathbb{Z}^d$ . Aqui, a constante  $q$  (carga ou constante de acoplamento, em termos físicos) poderia ser absorvida na função  $f$ . No entanto, uma vez que vamos variar essa quantidade de átomo para átomo mais tarde, é útil escrever o potencial da forma acima. Então, em um cristal regular, nossa partícula está exposta a um potencial total

$$V(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} qf(x - i). \tag{18}$$

A função  $f$  é chamada de *potencial de um único sítio* para distinguir do potencial total  $V$ . O potencial  $V$  em (18) é periódico com respeito ao reticulado  $\mathbb{Z}^d$ , ou seja,  $V(x - i) = V(x)$  para todo  $x \in \mathbb{R}^d$  e  $i \in \mathbb{Z}^d$ . A teoria matemática dos operadores de Schrödinger com potenciais periódicos está bem desenvolvida e baseia-se em uma análise minuciosa das propriedades de simetria dos operadores periódicos. Por exemplo, sabe-se que tais operadores apresentam, em geral, um espectro com estrutura de banda, isto é, para  $a_n < b_n < a_{n+1}$ ,

$$\sigma(H) = \bigcup_{n=0}^{\infty} [a_n, b_n]. \tag{19}$$

Este espectro também é conhecido como sendo *espectro absolutamente contínuo*, todavia, a maioria dos sólidos não constitui cristais ideais [3].

Considere o reticulado colméia, ilustrado na Figura 1(a), onde os vértices são representados como pontos pretos e brancos e as arestas como segmentos entre dois vértices.

O reticulado hexagonal pode ser visto como um modelo discreto do grafeno, que é uma chapa de carbono de camada única, bidimensional e com estrutura de colméia. Assim, operadores de Schrödinger discretos no reticulado hexagonal podem ser considerados como Hamiltonianos discretos sobre o grafeno. Em física, o grafeno é um dos mais interessantes objetos devido ao comportamento peculiar dos elétrons, e operadores de Schrödinger discretos

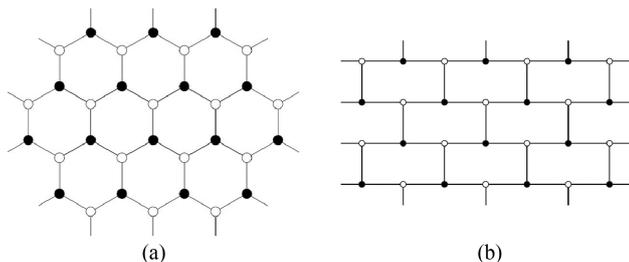


Figura 1: [9] O reticulado colméia visto como um grafo.

são largamente utilizados para investigar o grafeno. Outra abordagem é no estudo de grafos quânticos. Ando, em [9], considera o reticulado colméia como um grafo, cuja redistribuição dos sítios torna o reticulado uma "parede de tijolos" como na Figura 1b, o que facilita bastante a construção da matriz truncada do operador e, por consequência, o cálculo dos autovalores de tal matriz. A abordagem que utilizaremos para construção do potencial, de Fefferman e Weinstein [3], não abre mão da geometria do reticulado original. Note que a complexidade do reticulado estará embutida no potencial, então construir a matriz levando em conta um grafo mais simples do reticulado não eliminará a influência do reticulado original.

#### 3.1. Teoria de Floquet-Bloch

Considerando-se  $\{v_1, v_2\}$  uma base em  $\mathbb{R}^2$  e o reticulado

$$\Lambda = \{m_1v_1 + m_2v_2 : m_1, m_2 \in \mathbb{Z}\} = \mathbb{Z}v_1 \oplus \mathbb{Z}v_2, \tag{20}$$

a célula do período fundamental é denotada por

$$\Gamma = \{\theta_1v_1 + \theta_2v_2 : 0 \leq \theta_j \leq 1, j = 1, 2\}. \tag{21}$$

O espaço das funções que são periódicas com respeito ao reticulado  $\Lambda$  é denotado por  $L^2_{per,\Lambda} = L^2(\mathbb{R}^2/\Lambda)$ . Considerando-se um período  $\kappa$ , então  $f \in L^2_{\kappa,\Lambda}$  se, e somente se, para  $x \in \mathbb{R}^2$  e  $v \in \Lambda$ ,

$$f(x + v) = f(x)e^{i\kappa \cdot v}. \tag{22}$$

Como no produto escalar usual, temos  $x \cdot y$  onde  $x$  está no reticulado direto e  $y$  está no reticulado recíproco, ou dual. Ainda, dada uma matriz  $M$ , que age sobre  $x$  no reticulado direto, satisfaz  $M(x) \cdot y = x \cdot M^*(y)$  onde  $M^*$  é a matriz transposta de  $M$ . Por conta disso, precisamos também da noção do reticulado dual,  $\Lambda^*$ , definido como

$$\Lambda^* = \{m_1k_1 + m_2k_2 : m_1, m_2 \in \mathbb{Z}\} = \mathbb{Z}k_1 \oplus \mathbb{Z}k_2, \tag{23}$$

onde  $k_1$  e  $k_2$  são os vetores do reticulado dual, satisfazendo as relações  $k_i \cdot v_j = 2\pi\delta_{ij}$ . Se  $f \in L^2_{per,\Lambda}$  então  $f$  pode ser expandida em séries de Fourier

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{m \in \mathbb{Z}^2} f_m e^{imk \cdot x} \\ &= \sum_{(m_1, m_2) \in \mathbb{Z}^2} f_{(m_1, m_2)} e^{i(m_1k_1 + m_2k_2) \cdot x}, \end{aligned} \tag{24}$$

com coeficientes  $\hat{f} = \{f_m\}_{m \in \mathbb{Z}^2}$  dados por

$$\begin{aligned} f_m &= \frac{1}{|\Gamma|} \int_{\Gamma} e^{-imk \cdot y} f(y) dy \\ &= \frac{1}{|\Gamma|} \int_{\Gamma} e^{-i(m_1k_1 + m_2k_2) \cdot y} f(y) dy, \end{aligned} \tag{25}$$

onde  $|\Gamma|$  representa a área da célula de período fundamental  $\Gamma$ .

Seja  $V(x)$  o potencial real periódico com relação a  $\Lambda$ , ou seja, para  $x \in \mathbb{R}^2$  e  $v \in \Lambda$ ,

$$V(x + v) = V(x). \tag{26}$$

Para cada  $k \in \mathbb{R}^2$ , o problema do *autovalor de Floquet-Bloch* é dado por

$$H_V \phi(x, k) = \mu(k) \phi(x, k), \tag{27}$$

$$\phi(x + v, k) = e^{ik \cdot v} \phi(x, k), \tag{28}$$

onde  $x \in \mathbb{R}^2$ ,  $v \in \Lambda$  e  $H_V \equiv -\Delta + V(x)$ , cujas soluções, em  $L^2_{k, \Lambda}$ , são chamados de *estados de Floquet-Bloch* [3].

Como a solução do problema do autovalor ((27) e (28)) é invariante por mudança de variáveis  $k \mapsto k + \tilde{k}$ , onde  $\tilde{k} \in \Lambda^*$ , o reticulado periódico dual, os autovalores e autofunções de (27) e (28) podem ser considerados como funções  $\Lambda^*$ -periódica de  $k$ , o que é suficiente para restringir a atenção para  $k$  variando sobre um célula primitiva, o que é feito para utilizar-se a primeira zona de Brillouin,  $\mathcal{B}$ , definida como o fecho do conjunto dos pontos  $k \in \mathbb{R}^2$ , que está mais próximo da origem do que de qualquer outro ponto do reticulado dual. Para  $k \in \mathcal{B}$ , defina

$$\phi(x, k) = e^{ik \cdot x} p(x, k), \tag{29}$$

satisfazendo, para  $x \in \mathbb{R}^2$  e  $v \in \Lambda$ ,

$$H_V(k) p(x, k) = \mu(k) p(x, k), \tag{30}$$

$$p(x + v, k) = p(x, k), \tag{31}$$

onde

$$H_V(k) \equiv -(\nabla + ik)^2 + V(x) \equiv -\Delta_k + V(x). \tag{32}$$

O problema do autovalor (30) e (31) tem um espectro discreto dado por

$$\mu_1(k) \leq \mu_2(k) \leq \mu_3(k) \leq \dots \tag{33}$$

com autopares  $(\mu_b(k), p_b(x, k))$ , para  $b = 1, 2, 3, \dots$ . O conjunto  $\{p_b(x, k)\}_{b \geq 1}$  pode ser tomado como um conjunto ortonormal completo em  $L^2_{per}(\mathbb{R}^2/\Lambda)$  (conforme Teorema Espectral, veja [10]). As funções  $\mu_b(k)$  são chamadas funções de dispersão de bandas. Como  $k$  varia sobre  $\mathcal{B}$ ,  $\mu_b(k)$  varre um intervalo fechado da reta real. O espectro de  $-\Delta + V(x)$  em  $L^2(\mathbb{R}^2)$  é a união desses intervalos fechados

$$\sigma(H_V) = \bigcup_{k \in \mathcal{B}} \sigma(H_V(k)). \tag{34}$$

Para mais detalhes, veja [3].

### 3.2. O reticulado periódico e seu dual

Seja  $\Lambda_h = \mathbb{Z}v_1 \oplus \mathbb{Z}v_2$  o reticulado gerado pelos vetores da base

$$v_1 = a \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad v_2 = a \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad a > 0, \tag{35}$$

e o reticulado dual  $\Lambda_h^* = \mathbb{Z}k_1 \oplus \mathbb{Z}k_2$  é gerado pelos vetores da base dual

$$k_1 = q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad k_2 = q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad q \equiv \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}, \tag{36}$$

onde  $k_i \cdot v_j = 2\pi\delta_{ij}$ ,  $|v_1| = |v_2| = a$  e  $|k_1| = |k_2| = q$ , de onde vem  $v_1 \cdot v_2 = \frac{a^2}{2}$  e  $k_1 \cdot k_2 = -\frac{q^2}{2}$ .

Por [3], a primeira zona de Brillouin,  $\mathcal{B}_h$ , é um hexágono em  $\mathbb{R}^2$  representado na Figura 2.

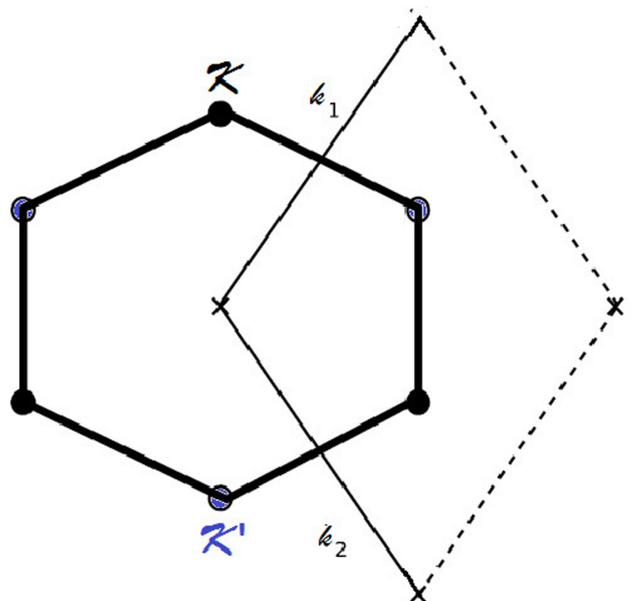
Denotando por  $K$  e  $K'$  os vértices de  $\mathcal{B}_h$ , estes são dados por  $K \equiv \frac{1}{3}(k_1 - k_2)$  e  $K' \equiv -K = \frac{1}{3}(k_2 - k_1)$ . Todos os seis vértices podem ser gerados pela aplicação de uma matriz de rotação,  $R$ , que roda um vetor em  $\mathbb{R}^2$  em um ângulo de  $\frac{2\pi}{3}$  no sentido horário, levando um vértice preto  $K$  em outro vértice preto ( $R(K)$ ), que por sua vez é levado por  $R$  no último vértice preto do hexágono,  $R^2(K) = R \circ R(K)$ , pois se rodarmos mais uma vez  $\frac{2\pi}{3}$  no sentido horário (o que significa aplicar  $R$  mais uma vez), fechamos o ciclo e voltamos ao vértice preto  $K$ , já que  $R^3(K) = K$ . O mesmo acontece com os vértices azuis  $K'$ .

A matrix  $R$  é dada por

$$R = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \tag{37}$$

Os vértices de  $\mathcal{B}_h$  caem em dois grupos, gerados pela ação de  $R$  sobre  $K$  e  $K'$ : os ponto de tipo  $K$ , satisfazendo

$$\begin{aligned} R(K) &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \left[ \frac{q}{3} \left( \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \right) \right] \\ &= \frac{q}{3} \begin{pmatrix} \frac{3}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} = q \left[ \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \right] \\ &= K + k_2, \end{aligned} \tag{38}$$



**Figura 2:** [3] Zona de Brillouin,  $\mathcal{B}_h$ , e a base dual  $\{k_1, k_2\}$ . Os outros vértices de  $\mathcal{B}_h$  são obtidos via aplicação de  $R$ .

ou seja,

$$R(K) = K + k_2, \tag{39}$$

e da mesma forma,

$$\begin{aligned} R^2(K) &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \left[ \frac{q}{3} \left( \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \right) \right] \\ &= \frac{q}{3} \begin{pmatrix} -\frac{3}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} = q \left[ \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \right] \\ &= K - k_1, \end{aligned} \tag{40}$$

então,

$$R^2(K) = K - k_1, \tag{41}$$

e os pontos de tipo  $K'$ , da mesma forma satisfazem

$$R(K') = K' - k_2 \quad \text{e} \quad R^2(K') = K' + k_1. \tag{42}$$

Além disso, a matriz

$$R^* = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{43}$$

aplica o reticulado periódico  $\Lambda_h$  nele mesmo. Em particular,  $R^*v_1 = -v_2$ , e  $R^*v_2 = v_1 - v_2$ . Para mais detalhes, veja [3].

### 3.3. Potencial Colméia

Para qualquer função  $f$  definida em  $\mathbb{R}^2$ , por [3], defina

$$\mathcal{R}[f](x) = f(R^*x), \tag{44}$$

onde  $R$  é a matriz de rotação dada em (37). Um potencial real  $V$  é um potencial colméia se existe  $x_0 \in \mathbb{R}^2$  tal que

$$\tilde{V}(x) = V(x - x_0) \tag{45}$$

tem as seguintes propriedades:

1. Para todo  $x \in \mathbb{R}^2$  e  $v \in \Lambda_h$ ,  $\tilde{V}(x + v) = \tilde{V}(x)$ ;
2.  $\tilde{V}(-x) = \tilde{V}(x)$ ;
3.  $\tilde{V}$  é  $\mathcal{R}$ -invariante, ou seja,

$$\mathcal{R}[\tilde{V}](x) = \tilde{V}(R^*x) = \tilde{V}(x), \tag{46}$$

onde  $R^*$  é a matriz de rotação que gira um vetor  $\frac{2\pi}{3}$  no sentido anti-horário, isto é,

$$R^* = R^{-1}. \tag{47}$$

Dados os pontos  $A = (0, 0)$  e  $B = a \left( \frac{1}{\sqrt{3}}, 0 \right)$ , os quais pertencem a uma célula unitária periódica de  $\Lambda_h$ . Definindo os reticulados triangulares de tipo  $A$  e de tipo  $B$ ,  $\Lambda_A = A + \Lambda_h$  e  $\Lambda_B = B + \Lambda_h$ , respectivamente, a estrutura de colméia,  $\mathcal{C}$ , é definida como a união desses dois reticulados triangulares

$$\mathcal{C} = \Lambda_A \cup \Lambda_B \tag{48}$$

e representada na Figura 3.

Seja  $V_0$  uma função radial, suave e com decrescimento rápido, a qual é vista como um "potencial atômico". Então

$$V(x) = \sum_{a \in \mathcal{C}} V_0(x - a) \tag{49}$$

é um potencial associado com "átomos" em cada sítio da estrutura de colméia  $\mathcal{C}$ . Pondo  $x_0 = -B$  na equação (45),  $V(x)$  satisfaz as condições do potencial reticulado de colméia.

Outro potencial interessante é o potencial ótico no reticulado de colméia [3]. O invólucro do campo elétrico de um feixe de luz quase monocromático propagando-se através de um meio dielétrico com perfil de índice de refração bidimensional satisfaz a equação de Schrödinger linear

$$i\partial_z\psi = -\Delta_{x,y}\psi + V(x,y)\psi = 0, \tag{50}$$

onde  $z$  denota a direção de propagação do feixe e  $(x, y)$  a direção transversa. As variações do índice de refração são dados por um potencial de forma aproximada a

$$\begin{aligned} V(x, y) &\approx V_0 [\cos(k_1 \cdot (x, y)) + \cos(k_2 \cdot (x, y))] \\ &\quad + V_0 [\cos((k_1 + k_2) \cdot (x, y))]. \end{aligned} \tag{51}$$

**Proposição 3.1** [3] *Seja  $V$  um potencial do reticulado colméia e assuma que  $K_*$  é um ponto do tipo  $K$  ou  $K'$ . Se  $\phi(x, k)$  é uma solução do problema do autovvalor de Floquet-Bloch ((27) e (28)) com  $k = K_*$ , então  $\mathcal{R}[\phi(\cdot, k)](x)$  é também uma solução de (27) e (28) com  $k = K_*$ .*

Demonstração. Definindo

$$\phi_R(x) = \mathcal{R}[\phi(\cdot, K_*)](x) = \phi(R^*x, K_*) \tag{52}$$

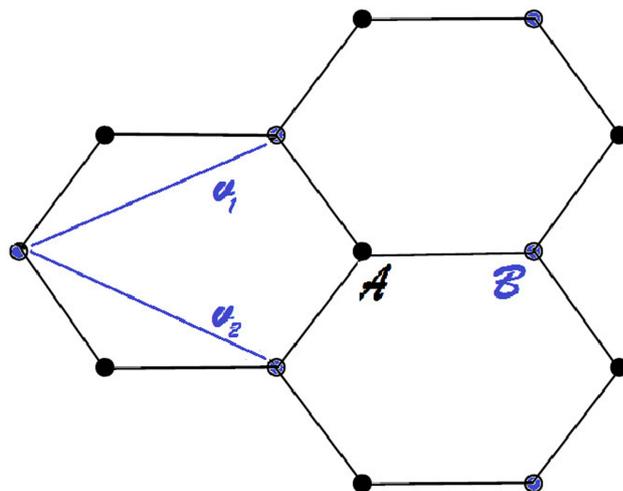


Figura 3: [3] Parte da estrutura de colméia  $\mathcal{C} = \Lambda_A \cup \Lambda_B$ .

e assumindo, sem perda de generalidade, que  $K_* = K$ , se  $v \in \Lambda_h$  então  $R^*v \in \Lambda_h$ . Assim

$$\begin{aligned} \phi_R(x+v) &= \phi(R^*x + R^*v, K) \\ &= e^{iK \cdot R^*v} \phi(R^*x, K) \\ &= e^{iRK \cdot v} \phi(R^*x, K) \\ &= e^{i(K+k_2) \cdot v} \phi(R^*x, K) \\ &= e^{iK \cdot v} \phi(R^*x, K) \\ &= e^{iK \cdot v} \phi_R(x), \end{aligned} \tag{53}$$

de onde  $\mathcal{R}$  aplica

$$C_{K_*}^\infty = \{f \in C^\infty : f(x+v) = e^{iK_* \cdot v} f(x), x \in \mathbb{R}^2, v \in \Lambda_h\} \tag{54}$$

nele próprio. Além disso,  $\phi_R(x) = \phi(R^*x, K_*) = \phi(y, K_*)$  para  $y = R^*x$ , logo

$$-\Delta_x \phi_R(x) = -\Delta_y \phi(y, K_*)|_{y=R^*x} \tag{55}$$

pela invariância do Laplaciano por rotações. Denotando  $y = R^*x$  e  $\phi(\cdot, K_*) = \phi(\cdot)$ , temos

$$\begin{aligned} [H_V \mathcal{R}] \phi(x) &= [-\Delta + V(\cdot)] \mathcal{R} \phi(x) \\ &= [-\Delta + V(\cdot)] \phi(R^*x) \\ &= -\Delta_{R^*x} \phi(R^*x) + V(R^*x) \phi(R^*x) \\ &= -\Delta_y \phi(y) + V(y) \phi(y) \\ &= -\Delta_{R^*x} \phi(R^*x) + V(R^*x) \phi(R^*x) \\ &= \mathcal{R}[-\Delta_x \phi(x) + V(x) \phi(x)] \\ &= [\mathcal{R} H_V] \phi(x), \end{aligned} \tag{56}$$

de onde  $[H_V, \mathcal{R}] = H_V \mathcal{R} - \mathcal{R} H_V = 0$  em  $C_{K_*}^\infty$ . Em particular,  $H_V \phi(x, K_*) = \mu \phi(x, K_*)$ , logo  $H_V \phi_R(x) = \mu \phi_R(x)$ , então  $\mathcal{R}[\phi(\cdot, K_*)](x)$  é também uma solução de (27) e (28).  $\square$

Considere o potencial  $V(x)$  cuja série de Fourier é dada por

$$\begin{aligned} V(x) &= \sum_{m \in \mathbb{Z}^2} V_m e^{imk \cdot x} \\ &= \sum_{(m_1, m_2) \in \mathbb{Z}^2} V_{(m_1, m_2)} e^{i(m_1 k_1 + m_2 k_2) \cdot x}. \end{aligned} \tag{57}$$

Como  $V(x) = \mathcal{R}[V](x)$  [3], temos

$$\begin{aligned} V(R^*x) &= \sum_{(m_1, m_2) \in \mathbb{Z}^2} V_{(m_1, m_2)} e^{i(m_1 Rk_1 + m_2 Rk_2) \cdot x} \\ &= \sum_{(m_1, m_2) \in \mathbb{Z}^2} V_{(m_1, m_2)} e^{i(-m_2 k_1 + (m_1 - m_2) Rk_2) \cdot x} \end{aligned} \tag{58}$$

pois  $R(k_1) = q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$  e  $R(k_2) = q \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , logo

$$\begin{aligned} m_1 Rk_1 + m_2 Rk_2 &= m_1 q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} + m_2 q \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= q \begin{pmatrix} \frac{m_1}{2} - m_2 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} m_1 \end{pmatrix} \\ &= q \begin{pmatrix} -\frac{m_2}{2} + \frac{m_1}{2} - \frac{m_2}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} m_2 - \frac{\sqrt{3}}{2} m_1 + \frac{\sqrt{3}}{2} m_2 \end{pmatrix} \\ &= -m_2 q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \\ &\quad + (m_1 - m_2) q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \\ &= -m_2 k_1 + (m_1 - m_2) k_2. \end{aligned} \tag{59}$$

Assim,  $V_{(m_1, m_2)} = V_{(-m_2, m_1 - m_2)}$ . Da mesma forma,  $V(x) = \mathcal{R}^2[V](x)$  implica  $V_{(m_1, m_2)} = V_{(m_2 - m_1, -m_1)}$ . Introduzindo a aplicação  $\tilde{R} : \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{Z}^2$  agindo nos índices dos coeficientes de Fourier de  $V$ ,

$$\tilde{R}(m_1, m_2) = (-m_2, m_1 - m_2), \tag{60}$$

$$\begin{aligned} \tilde{R}^2(m_1, m_2) &= \tilde{R}(-m_2, m_1 - m_2) \\ &= (m_2 - m_1, -m_1), \end{aligned} \tag{61}$$

$$\begin{aligned} \tilde{R}^3(m_1, m_2) &= \tilde{R}(m_2 - m_1, -m_1) \\ &= (m_1, m_2), \end{aligned} \tag{62}$$

temos

$$V_m = V_{\tilde{R}m} = V_{\tilde{R}^2m} \tag{63}$$

Ainda,  $\tilde{R}(0) = 0$  e  $\ker(\tilde{R}) = \{0\}$ . Além disso, qualquer  $m \neq 0$  pertence a uma órbita de  $\tilde{R}$  de comprimento três. De fato, se  $m = \tilde{R}m$ , então  $(m_1, m_2) = (-m_2, m_1 - m_2)$ , ou seja  $m_1 = m_2 = 0$ . Se  $m = \tilde{R}^2m$ , então  $(m_1, m_2) = (-m_1 + m_2, -m_1)$ , logo  $m_1 = m_2 = 0$ .

Suponha que  $m$  e  $n$  são não nulos. Dizemos que  $m \sim n$  se  $m$  e  $n$  pertencem ao mesmo 3-ciclo. A relação  $\sim$  é uma relação de equivalência, que particiona  $\mathbb{Z}^2 \setminus \{0\}$  em classes de equivalência,  $(\mathbb{Z}^2 \setminus \{0\}) / \sim$ . Denote por  $\tilde{S}$  o conjunto consistindo de exatamente um representante de cada classe de equivalência. Temos, portanto, a seguinte caracterização em séries de Fourier para potenciais do tipo reticulado colméia:

**Proposição 3.2** [3] *Seja  $V(x)$  um potencial reticulado colméia, com  $x \in \mathbb{R}^2$ . Então,*

$$\begin{aligned} V(x) &= \hat{V}(0) + \sum_{m \in \tilde{S}} V_m [\cos(mk \cdot x)] \\ &\quad + \sum_{m \in \tilde{S}} V_m [\cos((\tilde{R}m)k \cdot x)] \\ &\quad + \sum_{m \in \tilde{S}} V_m [\cos((\tilde{R}^2m)k \cdot x)], \end{aligned} \tag{64}$$

onde  $V_m$  é real e  $\tilde{R}$  é definida na equação (60).

Demonstração. De fato, como  $V_m = V_{\tilde{R}m} = V_{\tilde{R}^2m}$ , então

$$V(x) = \hat{V}(0) + \sum_{m \in \tilde{S}} V_m \left( e^{imk \cdot x} + e^{i(\tilde{R}m)k \cdot x} + e^{i(\tilde{R}^2m)k \cdot x} \right). \tag{65}$$

Como  $V(x) = \frac{1}{2} (V(x) + V(-x))$ , temos

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{V(x) + V(-x)}{2} \\ &= \hat{V}(0) + \sum_{m \in \tilde{S}} V_m \left( \frac{e^{imk \cdot x} + e^{-imk \cdot x}}{2} \right) \\ &+ \sum_{m \in \tilde{S}} V_m \left( \frac{e^{i(\tilde{R}m)k \cdot x} + e^{-i(\tilde{R}m)k \cdot x}}{2} \right) \\ &+ \sum_{m \in \tilde{S}} V_m \left( \frac{e^{i(\tilde{R}^2m)k \cdot x} + e^{-i(\tilde{R}^2m)k \cdot x}}{2} \right). \end{aligned} \tag{66}$$

Como  $\cos(w) = \frac{e^{iw} + e^{-iw}}{2}$  para  $w \in \mathbb{R}$ , segue

$$\begin{aligned} V(x) &= \hat{V}(0) + \sum_{m \in \tilde{S}} V_m [\cos(mk \cdot x)] \\ &+ \sum_{m \in \tilde{S}} V_m [\cos((\tilde{R}m)k \cdot x)] \\ &+ \sum_{m \in \tilde{S}} V_m [\cos((\tilde{R}^2m)k \cdot x)]. \end{aligned} \tag{67}$$

□

### 4. Reticulado cúbico simples

Entre os reticulados espaciais mais simples encontramos o reticulado cúbico, o qual tem sua célula do período fundamental formada por um cubo regular, ou seja, oito vértices igualmente espaçados e seis faces idênticas. A este, o qual será tratado aqui, denomina-se reticulado cúbico simples. Se adicionarmos um ponto no centro do cubo de período fundamental, o modelo muda substancialmente, tornando-se um reticulado cúbico centrado no corpo, em tradução livre (em inglês, BCC). Se, ao invés disso, adicionarmos um ponto em cada face, teremos um reticulado cúbico centrado na face (FCC). Estes dois modelos são duais entre si, ou seja, o reticulado dual (ou recíproco) do reticulado BCC é um FCC, e vice-versa. Para mais detalhes, consulte [4]. No caso do reticulado cúbico simples, seu dual é ele próprio e sua primeira zona de Brillouin é muito mais simples que nos reticulados BCC e FCC, retratadas graficamente na Figura 4. Faremos uma abordagem parecida com a abordagem de [3] no reticulado colméia no plano, dividindo os vértices do cubo em dois conjuntos de quatro vértices e, em cada conjunto, obtendo a partir de um vértice do conjunto os outros três através de uma matriz de rotação tridimensional. Esta matriz será a mesma para os dois conjuntos. Por fim,

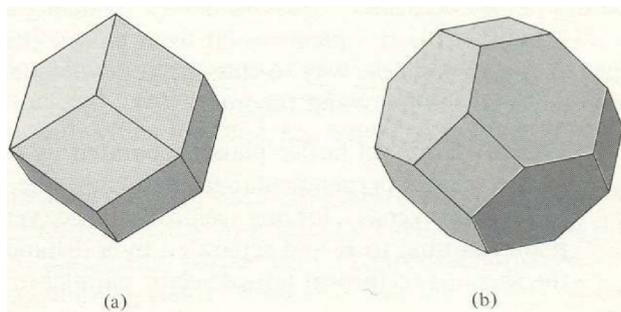


Figura 4: [4] Primeira zona de Brillouin para os reticulados a)BCC e b)FCC.

descreveremos um potencial periódico cujo argumento depende da órbita de tal matriz.

Sejam  $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3\}$  uma base ortonormal (vetores primitivos) em  $\mathbb{R}^3$ , o reticulado

$$\begin{aligned} \Lambda_3 &= \{m_1\mathbf{u}_1 + m_2\mathbf{u}_2 + m_3\mathbf{u}_3 : m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}\} \\ &= \mathbb{Z}\mathbf{u}_1 \oplus \mathbb{Z}\mathbf{u}_2 \oplus \mathbb{Z}\mathbf{u}_3, \end{aligned} \tag{68}$$

a célula do período fundamental

$$\Gamma_3 = \{\theta_1\mathbf{u}_1 + \theta_2\mathbf{u}_2 + \theta_3\mathbf{u}_3 : 0 \leq \theta_j \leq 1, j = 1, 2, 3\}, \tag{69}$$

o parâmetro  $a = 1$  relativo ao comprimento de cada aresta da célula de período fundamental e o espaço das funções periódicas com respeito ao reticulado  $\Lambda_3$ , denotado por  $L^2_{per, \Lambda_3} = L^2(\mathbb{R}^3/\Lambda_3)$ . Considerando-se um período  $\kappa$ , temos  $f \in L^2_{\kappa, \Lambda_3}$  se, e somente se, para  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  e  $\mathbf{u} \in \Lambda_3$ ,

$$f(\mathbf{x} + \mathbf{u}) = f(\mathbf{x})e^{i\kappa \cdot \mathbf{u}}. \tag{70}$$

O reticulado dual,  $\Lambda_3^*$ , também será um reticulado cúbico simples, cujo comprimento de cada aresta é  $2\pi$ , e é dado por

$$\begin{aligned} \Lambda_3^* &= \{m_1\mathbf{t}_1 + m_2\mathbf{t}_2 + m_3\mathbf{t}_3 : m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}\} \\ &= \mathbb{Z}\mathbf{t}_1 \oplus \mathbb{Z}\mathbf{t}_2 \oplus \mathbb{Z}\mathbf{t}_3, \end{aligned} \tag{71}$$

onde  $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2$  e  $\mathbf{t}_3$  satisfazem as relações  $\mathbf{t}_i \cdot \mathbf{u}_j = 2\pi\delta_{ij}$  para  $i, j = 1, 2, 3$ . Se  $f \in L^2_{per, \Lambda_3}$  então  $f$  pode ser expandida em séries de Fourier

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} f_{\mathbf{m}} e^{i\mathbf{m} \cdot \mathbf{x}} \\ &= \sum_{(m_1, m_2, m_3) \in \mathbb{Z}^3} f_{(m_1, m_2, m_3)} e^{i(m_1\mathbf{t}_1 + m_2\mathbf{t}_2 + m_3\mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{x}}, \end{aligned} \tag{72}$$

com coeficientes  $\hat{f} = \{f_{\mathbf{m}}\}_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3}$  dados por

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{m}} &= \frac{1}{|\Gamma_3|} \int_{\Gamma_3} e^{-i\mathbf{m} \cdot \mathbf{y}} f(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \\ &= \frac{1}{|\Gamma_3|} \int_{\Gamma_3} e^{-i(m_1\mathbf{t}_1 + m_2\mathbf{t}_2 + m_3\mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{y}} f(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \end{aligned} \tag{73}$$

onde  $|\Gamma_3|$  representa o volume da célula de período fundamental  $\Gamma_3$ .

Um potencial  $V(\mathbf{x})$  é um potencial real periódico com relação a  $\Lambda_3$  se, para  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  e  $\mathbf{u} \in \Lambda_3$ , vale

$$V(\mathbf{x} + \mathbf{u}) = V(\mathbf{x}). \tag{74}$$

4.1. O reticulado e seu dual

Considere uma base ortonormal, logo cada vetor tem comprimento um, de  $\Lambda_3$ , por exemplo,

$$\mathbf{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \mathbf{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{75}$$

e uma base dual de  $\Lambda_3^*$  (vetores primitivos do espaço recíproco) de comprimento  $2\pi$  dados por

$$\mathbf{t}_1 = \begin{pmatrix} 2\pi \\ \sqrt{2} \\ 2\pi \\ -\sqrt{6} \\ 2\pi \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \mathbf{t}_2 = \begin{pmatrix} 2\pi \\ \sqrt{2} \\ 2\pi \\ \sqrt{6} \\ 2\pi \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \mathbf{t}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 4\pi \\ \sqrt{6} \\ 2\pi \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \tag{76}$$

onde  $\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{t}_j = 2\pi\delta_{ij}$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ . Por [4], a primeira zona de Brillouin,  $\mathcal{B}$ , é também um reticulado cúbico simples, e é representada na Figura 5.

Denotando por  $K$  e  $K'$  dois vértices adjacentes de  $\mathcal{B}$ , escolhidos como  $K \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_3)$  e  $K' \equiv \frac{1}{2}(-\mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_3)$ . Todos os oito vértices podem ser gerados pela aplicação de uma matriz  $S$  dada por

$$S = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{2}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{2}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{3} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}}{3} & -\frac{1}{3} \end{pmatrix} \tag{77}$$

tal que  $S^4(K) = K$  e  $S^4(K') = K'$ . Os demais iterados de  $S$  em  $K$  e  $K'$  geram os outros seis vértices do cubo, retratados na Figura 6. Além disso, temos  $S(\mathbf{t}_1) = -\mathbf{t}_2$ ,  $S(\mathbf{t}_2) = \mathbf{t}_1$  e  $S(\mathbf{t}_3) = -\mathbf{t}_3$ . Tais vértices caem em dois grupos, gerados pela ação de  $S$  sobre  $K$  e  $K'$ : os ponto de tipo  $K$ , satisfazendo

$$\begin{aligned} S(K) &= \frac{1}{2}S(\mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_3) \\ &= \frac{1}{2}(S(\mathbf{t}_1) - S(\mathbf{t}_2) - S(\mathbf{t}_3)) \\ &= \frac{1}{2}(-\mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_3), \end{aligned} \tag{78}$$

logo

$$S(K) = \frac{1}{2}(-\mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3), \tag{79}$$

ou seja,

$$S(K) = K - \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_3, \tag{80}$$

da mesma forma,

$$\begin{aligned} S^2(K) &= \frac{1}{2}S(-\mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3) \\ &= \frac{1}{2}(-S(\mathbf{t}_1) - S(\mathbf{t}_2) + S(\mathbf{t}_3)) \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_3), \end{aligned} \tag{81}$$

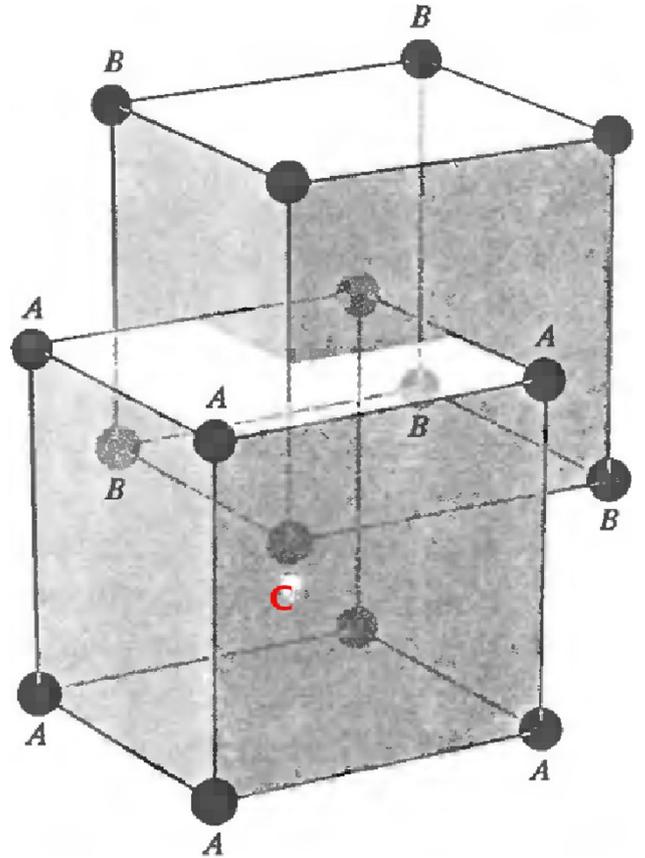


Figura 5: [4] Primeira zona de Brillouin  $\mathcal{B}$  com relação ponto  $C$  no reticulado dual. Os planos de Bragg são as faces do cubo de vértices  $A$  e intersectam ortogonalmente as faces do cubo de vértices  $B$  de modo que a distância entre cada plano de Bragg o ponto  $C$  seja idêntica a distância entre o plano de Bragg e o vértice  $B$  mais próximo.

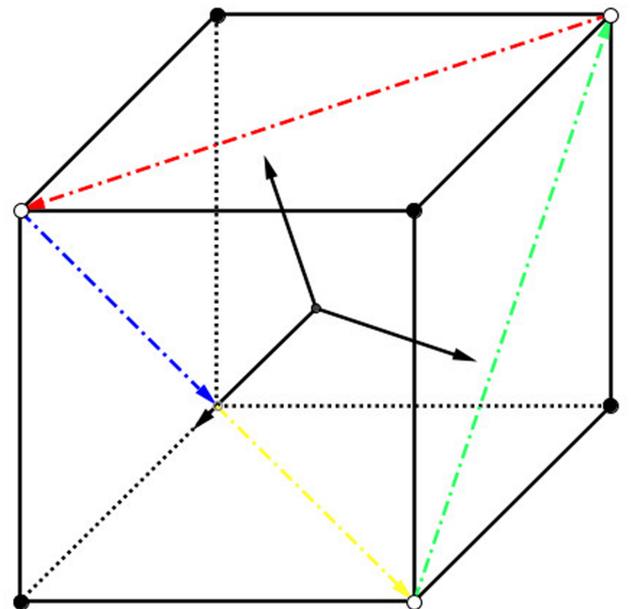


Figura 6: A matriz  $S$  transforma pontos brancos em pontos brancos. Da mesma forma, leva pontos pretos em pontos pretos.

então,

$$S^2(K) = \frac{1}{2}(-\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_3), \tag{82}$$

ainda,

$$\begin{aligned} S^3(K) &= \frac{1}{2}S(-\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_3) \\ &= \frac{1}{2}(-S(\mathbf{t}_1) + S(\mathbf{t}_2) - S(\mathbf{t}_3)) \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_3), \end{aligned} \tag{83}$$

logo,

$$S^3(K) = \frac{1}{2}(\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3). \tag{84}$$

Já os pontos de tipo  $K'$ , da mesma forma satisfazem

$$S(K') = \frac{1}{2}(-\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3), \tag{85}$$

$$S^2(K') = \frac{1}{2}(\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_3), \tag{86}$$

$$S^3(K') = \frac{1}{2}(\mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3). \tag{87}$$

Além disso, a matriz

$$S^* = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{2}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{3} \\ -\frac{2}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}}{3} & -\frac{1}{3} \end{pmatrix} \tag{88}$$

aplica o reticulado periódico  $\Lambda_3$  nele mesmo. Em particular,

$$\begin{aligned} s^* \mathbf{u}_1 &= -\frac{1}{3}\mathbf{u}_1 + \left(\frac{1-\sqrt{2}}{3} - \frac{\sqrt{3}+\sqrt{6}}{9}\right)\mathbf{u}_2 - \left(\frac{1+\sqrt{2}}{3} + \frac{\sqrt{3}-\sqrt{6}}{9}\right)\mathbf{u}_3, \\ s^* \mathbf{u}_2 &= \frac{\sqrt{6}-2\sqrt{2}-2}{6\sqrt{3}}\mathbf{u}_1 - \left(\frac{1}{3\sqrt{3}} + \frac{6+8\sqrt{2}-\sqrt{6}}{18}\right)\mathbf{u}_2 + \left(\frac{2}{3\sqrt{6}} + \frac{6+4\sqrt{3}}{9}\right)\mathbf{u}_3, \\ s^* \mathbf{u}_3 &= \left(\frac{1+\sqrt{2}}{3} + \frac{\sqrt{2}-1}{3\sqrt{3}}\right)\mathbf{u}_1 + \frac{1-3\sqrt{3}}{9}\mathbf{u}_2 + \frac{2\sqrt{2}-3}{9}\mathbf{u}_3. \end{aligned}$$

### 4.2. Potencial cúbico simples

A partir da construção do potencial do tipo colméia, construiremos um potencial periódico tridimensional nos mesmos moldes. Para qualquer função  $f$  definida em  $\mathbb{R}^3$  defina

$$\mathcal{S}[f](\mathbf{x}) = f(S^*\mathbf{x}), \tag{89}$$

onde  $S^*$  é a matriz (88). Um potencial real  $V$  será uma adaptação do potencial colméia se existe  $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^3$  tal que

$$\tilde{V}(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \tag{90}$$

tem as seguintes propriedades:

1. Para todo  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  e  $\mathbf{u} \in \Lambda_3$ ,  $\tilde{V}(\mathbf{x} + \mathbf{u}) = \tilde{V}(\mathbf{x})$ ;
2.  $\tilde{V}(-\mathbf{x}) = \tilde{V}(\mathbf{x})$ ;

3.  $\tilde{V}$  é  $\mathcal{S}$ -invariante, ou seja,

$$\mathcal{S}[\tilde{V}](\mathbf{x}) = \tilde{V}(S^*\mathbf{x}) = \tilde{V}(\mathbf{x}), \tag{91}$$

onde  $S^*$  é a matriz (88), e por ser ortogonal,

$$S^* = S^{-1}. \tag{92}$$

**Proposição 4.1** *Seja  $V$  um potencial do reticulado cúbico simples e assumamos que  $K_*$  é um ponto do tipo  $K$  ou  $K'$ . Se  $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$  é uma solução do problema do autovalor de Floquet-Bloch (tridimensional, adaptando (27) e (28)) com  $k = K_*$ , então  $\mathcal{S}[\phi(\cdot, \mathbf{k})](\mathbf{x})$  é também uma solução com  $k = K_*$ .*

Demonstração. Definindo

$$\phi_S(x) = \mathcal{S}[\phi(\cdot, K_*)](\mathbf{x}) = \phi(S^*\mathbf{x}, K_*) \tag{93}$$

e assumindo, sem perda de generalidade, que  $K_* = K$ , se  $\mathbf{u} \in \Lambda_3$  então  $S^*\mathbf{u} \in \Lambda_3$ . Assim

$$\begin{aligned} \phi_S(\mathbf{x} + \mathbf{u}) &= \phi(S^*\mathbf{x} + S^*\mathbf{u}, K) \\ &= e^{iK \cdot S^*\mathbf{u}} \phi(S^*\mathbf{x}, K) \\ &= e^{iS(K) \cdot \mathbf{u}} \phi(S^*\mathbf{x}, K) \\ &\stackrel{(80)}{=} e^{i(K-\mathbf{t}_1+\mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{u}} \phi(S^*\mathbf{x}, K) \\ &= e^{iK \cdot \mathbf{u}} \phi(S^*\mathbf{x}, K) \\ &= e^{iK \cdot \mathbf{u}} \phi_S(\mathbf{x}), \end{aligned} \tag{94}$$

uma vez que, para  $r = 1, 3$  e  $c_j \in \mathbb{Z}$ ,  $j = 1, 2, 3$ ,

$$\mathbf{t}_r \cdot \mathbf{u} = \mathbf{t}_r \cdot \sum_{j=1}^3 c_j \mathbf{u}_j = 2\pi c_r \tag{95}$$

e  $e^{2\pi i} = 1$ , de onde  $\mathcal{S}$  aplica

$$C_{K_*}^\infty = \{f \in C^\infty : f(\mathbf{x} + \mathbf{u}) = e^{iK_* \cdot \mathbf{u}} f(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \mathbf{u} \in \Lambda_3\} \tag{96}$$

nele próprio. Além disso,

$$\phi_S(\mathbf{x}) = \phi(S^*\mathbf{x}, K_*) = \phi(\mathbf{y}, K_*) \tag{97}$$

para  $\mathbf{y} = S^*\mathbf{x}$ , logo

$$-\Delta_{\mathbf{x}} \phi_S(\mathbf{x}) = -\Delta_{\mathbf{y}} \phi(\mathbf{y}, K_*)|_{\mathbf{y}=S^*\mathbf{x}} \tag{98}$$

pela invariância do Laplaciano por rotações. Denotando  $\mathbf{y} = S^*\mathbf{x}$  e  $\phi(\cdot, K_*) = \phi(\cdot)$ , temos

$$\begin{aligned} [H_V \mathcal{S}]\phi(\mathbf{x}) &= [-\Delta + V(\cdot)]\mathcal{S}\phi(\mathbf{x}) \\ &= [-\Delta + V(\cdot)]\phi(S^*\mathbf{x}) \\ &= -\Delta_{S^*\mathbf{x}} \phi(S^*\mathbf{x}) + V(S^*\mathbf{x})\phi(S^*\mathbf{x}) \\ &= -\Delta_{\mathbf{y}} \phi(\mathbf{y}) + V(\mathbf{y})\phi(\mathbf{y}) \\ &= -\Delta_{S^*\mathbf{x}} \phi(S^*\mathbf{x}) + V(S^*\mathbf{x})\phi(S^*\mathbf{x}) \\ &= \mathcal{S}[-\Delta_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})] \\ &= [\mathcal{S}H_V]\phi(\mathbf{x}), \end{aligned} \tag{99}$$

de onde  $[H_V, \mathcal{S}] = H_V \mathcal{S} - \mathcal{S} H_V = 0$  em  $C_{K_*}^\infty$ . Em particular,  $H_V \phi(\mathbf{x}, K_*) = \mu \phi(\mathbf{x}, K_*)$ , logo  $H_V \phi_S(\mathbf{x}) = \mu \phi_S(\mathbf{x})$ , então  $\mathcal{S}[\phi(\cdot, K_*)](x)$  é também uma solução das equações adaptadas (27) e (28).  $\square$

Considere o potencial  $V(\mathbf{x})$  cuja série de Fourier é dada, para  $\mathbf{m} = (m_1, m_2, m_3)$ , por

$$\begin{aligned} V(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i\mathbf{m}k \cdot \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(m_1 \mathbf{t}_1 + m_2 \mathbf{t}_2 + m_3 \mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{x}}. \end{aligned} \quad (100)$$

Como  $V(\mathbf{x}) = \mathcal{S}[V](\mathbf{x})$ , adaptando [3] e aplicando ao nosso caso, temos

$$\begin{aligned} V(S^* \mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(m_1 \mathbf{t}_1 + m_2 \mathbf{t}_2 + m_3 \mathbf{t}_3) \cdot S^* \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(m_1 S(\mathbf{t}_1) + m_2 S(\mathbf{t}_2) + m_3 S(\mathbf{t}_3)) \cdot \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(-m_1 \mathbf{t}_2 + m_2 \mathbf{t}_1 - m_3 \mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(m_2 \mathbf{t}_1 - m_1 \mathbf{t}_2 - m_3 \mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{x}} \end{aligned} \quad (101)$$

pois  $S(\mathbf{t}_1) = -\mathbf{t}_2$ ,  $S(\mathbf{t}_2) = \mathbf{t}_1$  e  $S(\mathbf{t}_3) = -\mathbf{t}_3$ . Assim,  $V_{(m_1, m_2, m_3)} = V_{(m_2, -m_1, -m_3)}$ . Da mesma forma,  $V(\mathbf{x}) = \mathcal{S}^2[V](\mathbf{x})$  implica

$$\begin{aligned} V(S^{*2} \mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(m_2 \mathbf{t}_1 - m_1 \mathbf{t}_2 - m_3 \mathbf{t}_3) \cdot S^{*2} \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(m_2 S(\mathbf{t}_1) - m_1 S(\mathbf{t}_2) - m_3 S(\mathbf{t}_3)) \cdot \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(-m_2 \mathbf{t}_2 - m_1 \mathbf{t}_1 + m_3 \mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(-m_1 \mathbf{t}_1 - m_2 \mathbf{t}_2 + m_3 \mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{x}} \end{aligned} \quad (102)$$

logo  $V_{(m_1, m_2, m_3)} = V_{(m_2, -m_1, -m_3)} = V_{(-m_1, -m_2, m_3)}$ . Ainda,  $V(\mathbf{x}) = \mathcal{S}^3[V](\mathbf{x})$  implica

$$\begin{aligned} V(S^{*3} \mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(-m_1 \mathbf{t}_1 - m_2 \mathbf{t}_2 + m_3 \mathbf{t}_3) \cdot S^{*3} \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(-m_1 S(\mathbf{t}_1) - m_2 S(\mathbf{t}_2) + m_3 S(\mathbf{t}_3)) \cdot \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(m_1 \mathbf{t}_2 - m_2 \mathbf{t}_1 - m_3 \mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(-m_2 \mathbf{t}_1 + m_1 \mathbf{t}_2 - m_3 \mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{x}}, \end{aligned} \quad (103)$$

$V_{\mathbf{m}} = V_{(m_2, -m_1, -m_3)} = V_{(-m_1, -m_2, m_3)} = V_{(-m_2, m_1, -m_3)}$ . É esperado que  $V(\mathbf{x}) = \mathcal{S}^4[V](\mathbf{x})$  nos faça retornar aos

índices iniciais. De fato,

$$\begin{aligned} V(S^{*4} \mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(-m_2 \mathbf{t}_1 + m_1 \mathbf{t}_2 - m_3 \mathbf{t}_3) \cdot S^{*4} \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(-m_2 S(\mathbf{t}_1) + m_1 S(\mathbf{t}_2) - m_3 S(\mathbf{t}_3)) \cdot \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(m_2 \mathbf{t}_2 + m_1 \mathbf{t}_1 + m_3 \mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^3} V_{\mathbf{m}} e^{i(m_1 \mathbf{t}_1 + m_2 \mathbf{t}_2 + m_3 \mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{x}}. \end{aligned} \quad (104)$$

Introduzindo a aplicação  $\tilde{S} : \mathbb{Z}^3 \rightarrow \mathbb{Z}^3$  agindo nos índices dos coeficientes de Fourier de  $V$ ,

$$\tilde{S}(m_1, m_2, m_3) = (m_2, -m_1, -m_3), \quad (105)$$

$$\tilde{S}^2(m_1, m_2, m_3) = (-m_1, -m_2, m_3), \quad (106)$$

$$\tilde{S}^3(m_1, m_2, m_3) = (-m_2, m_1, -m_3), \quad (107)$$

$$\tilde{S}^4(m_1, m_2, m_3) = (m_1, m_2, m_3), \quad (108)$$

temos

$$V_{\mathbf{m}} = V_{\tilde{S}\mathbf{m}} = V_{\tilde{S}^2\mathbf{m}} = V_{\tilde{S}^3\mathbf{m}}. \quad (109)$$

Ainda,  $\tilde{S}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$  e  $\ker(\tilde{S}) = \{\mathbf{0}\}$ . Além disso, qualquer  $\mathbf{m} \neq \mathbf{0}$  pertence a uma órbita de  $\tilde{S}$  de comprimento quatro. De fato, se  $\mathbf{m} = \tilde{S}\mathbf{m}$ , então  $(m_1, m_2, m_3) = (m_2, -m_1, -m_3)$ , ou seja  $m_1 = m_2 = m_3 = 0$ . Se  $\mathbf{m} = \tilde{S}^2\mathbf{m}$ , então  $(m_1, m_2, m_3) = (-m_1, -m_2, m_3)$ , logo  $m_1 = m_2 = 0$ , mas o vetor  $(0, 0, m_3)$  pertence a uma órbita de comprimento dois, e como dois é divisor de quatro, este também pertence a uma órbita de comprimento quatro. Se  $\mathbf{m} = \tilde{S}^3\mathbf{m}$ , então  $(m_1, m_2, m_3) = (-m_2, m_1, -m_3)$ , logo  $m_1 = m_2 = m_3 = 0$ .

Suponha que  $m$  e  $n$  são não nulos. Dizemos que  $m \sim n$  se  $m$  e  $n$  pertencem ao mesmo 4-ciclo. A relação  $\sim$  é uma relação de equivalência, que particiona  $\mathbb{Z}^3 \setminus \{\mathbf{0}\}$  em classes de equivalência,  $(\mathbb{Z}^3 \setminus \{\mathbf{0}\}) / \sim$ . Denote por  $\tilde{W}$  o conjunto consistindo de exatamente um representante de cada classe de equivalência. Temos, portanto, a seguinte caracterização em séries de Fourier para potenciais cúbicos simples:

**Proposição 4.2** *Seja  $V(\mathbf{x})$  um potencial cúbico simples com  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ . Então,*

$$\begin{aligned} V(x) &= \hat{V}(0) + \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} [\cos(\mathbf{m}k \cdot \mathbf{x})] \\ &+ \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} \cos((\tilde{S}\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}) \\ &+ \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} \cos((\tilde{S}^2\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}) \\ &+ \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} \cos((\tilde{S}^3\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}), \end{aligned} \quad (110)$$

onde  $V_{\mathbf{m}}$  é real e  $\tilde{S}$  é definida na equação (105).

Demonstração. De fato, como  $V_{\mathbf{m}} = V_{\tilde{S}\mathbf{m}} = V_{\tilde{S}^2\mathbf{m}} = V_{\tilde{S}^3\mathbf{m}}$ , então

$$\begin{aligned}
 V(\mathbf{x}) &= \hat{V}(0) \\
 &+ \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} \left( e^{i\mathbf{m}k \cdot \mathbf{x}} + e^{i(\tilde{S}\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}} \right) \\
 &+ \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} \left( e^{i(\tilde{S}^2\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}} + e^{i(\tilde{S}^3\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}} \right) \quad (111)
 \end{aligned}$$

Como  $V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (V(\mathbf{x}) + V(-\mathbf{x}))$ , temos

$$\begin{aligned}
 V(\mathbf{x}) &= \frac{V(\mathbf{x}) + V(-\mathbf{x})}{2} \quad (112) \\
 &= \hat{V}(0) + \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} \left( \frac{e^{i\mathbf{m}k \cdot \mathbf{x}} + e^{-i\mathbf{m}k \cdot \mathbf{x}}}{2} \right) \\
 &+ \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} \left( \frac{e^{i(\tilde{S}\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}} + e^{-i(\tilde{S}\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}}}{2} \right) \\
 &+ \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} \left( \frac{e^{i(\tilde{S}^2\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}} + e^{-i(\tilde{S}^2\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}}}{2} \right) \\
 &+ \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} \left( \frac{e^{i(\tilde{S}^3\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}} + e^{-i(\tilde{S}^3\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x}}}{2} \right).
 \end{aligned}$$

Como  $\cos(w) = \frac{e^{iw} + e^{-iw}}{2}$  para  $w \in \mathbb{R}$ , segue

$$\begin{aligned}
 V(\mathbf{x}) &= \hat{V}(0) + \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} [\cos(\mathbf{m}k \cdot \mathbf{x})] \\
 &+ \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} [\cos((\tilde{S}\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x})] \\
 &+ \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} [\cos((\tilde{S}^2\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x})] \\
 &+ \sum_{\mathbf{m} \in \tilde{W}} V_{\mathbf{m}} [\cos((\tilde{S}^3\mathbf{m})k \cdot \mathbf{x})]. \quad (113)
 \end{aligned}$$

□

### 5. Considerações Finais

Baseados nos resultados de [3] obtidos sobre uma rede bidimensional do tipo colméia, adaptamos para um rede cúbica simples uma caracterização via séries de Fourier para potenciais periódicos dos operadores de Schrödinger. Tal resultado é relevante pois ele garante que qualquer potencial assumindo condições necessárias de simetria no reticulado pode ser reescrito de forma muito mais simples como somas de cossenos.

### Agradecimentos

Os autores agradecem ao professor Leonardo de Lima pela revisão minuciosa de parte deste trabalho, ao professor Tobias Heimfarth pelas conversas e ao referee anônimo pelas contribuições sem as quais este trabalho não seria viabilizado.

### Referências

- [1] M. Massimi, *Pauli's Exclusion Principle: The Origin and Validation of a Scientific Principle* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005).
- [2] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).
- [3] C.L. Fefferman e M.I. Weinstein, R.J. Amer. Math. Soc. **25**, 1169 (2012).
- [4] N.W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid States Physics* (Cengage Learning, Inc, Califórnia, 1976).
- [5] F. Bloch, Zeitschrift für Physik **52**, 555 (1929).
- [6] D. Park, *Introduction to the Quantum Theory* (MacGraw-Hill, New York, 1974), 2ª ed.
- [7] S. Fujita e K. Ito, *Quantum Theory of Conducting Matter* (Springer, New York, 2007).
- [8] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley and Sons, Nova Iorque, 1996) 7ª ed.
- [9] K. Ando, Annales Henry Poincaré **14**, 347 (2013).
- [10] M.M. Skriganov, *Geometric and Arithmetic Methods in the Spectral Theory of Multidimensional Periodic Operators* (American Mathematical Society, Providence, 1987).