

Universidade Estadual Paulista
Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de
Materiais

Arianne Vellasco Gomes

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE CRISTAIS: GENERALIZAÇÃO MEDIANTE O
CÁLCULO FRACIONÁRIO

Bauru
2018

Arianne Vellasco Gomes

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE CRISTAIS: GENERALIZAÇÃO MEDIANTE O
CÁLCULO FRACIONÁRIO

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, como requisito à obtenção do título de Doutora em Ciência e Tecnologia de Materiais, sob a orientação do professor Dr. Alexys Bruno Alfonso e coorientação do professor Dr. Rubens de Figueiredo Camargo.

Bauru
2018

Velasco-Gomes, Arianne.

Estrutura eletrônica de cristais: Generalização
mediante o Cálculo Fracionário / Arianne Velasco
Gomes, 2018

152 f. : il.

Orientador: Alexys Bruno Alfonso

Coorientador: Rubens de Figueiredo Camargo

Tese (Doutorado)-Universidade Estadual
Paulista. Faculdade de Ciências, Bauru, 2018

1. Equação de Schrödinger fracionária. 2. Função
de Wannier. 3. Comportamento assintótico. 4. Derivada
de Riesz. 5. Cálculo Fracionário. 6. Estado
localizado. I. Universidade Estadual Paulista.
Faculdade de Ciências. II. Título.

ATA DA DEFESA PÚBLICA DA TESE DE DOUTORADO DE ARIANNE VELLASCO GOMES, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS, DA FACULDADE DE CIÊNCIAS - CÂMPUS DE BAURU.

Aos 17 dias do mês de abril do ano de 2018, às 14:00 horas, no(a) Auditório do Laboratório Didático de Matemática - Faculdade de Ciências - UNESP/Bauru, reuniu-se a Comissão Examinadora da Defesa Pública, composta pelos seguintes membros: Prof. Dr. ALEXYS BRUNO ALFONSO - Orientador(a) do(a) Departamento de Matemática / Faculdade de Ciências de Bauru, Prof. Dr. EDMUNDO CAPELAS DE OLIVEIRA do(a) Departamento de Matemática Aplicada / Universidade Estadual de Campinas, Prof. Dr. JULIO RICARDO SAMBRANO do(a) Departamento de Matemática / Faculdade de Ciências de Bauru, Prof. Dr. DENIS RAFAEL NACBAR do(a) Departamento de Matemática / Instituto Federal de São Paulo - Câmpus de Bragança Paulista, Prof. Dr. AUGUSTO BATAGIN NETO do(a) Coordenadoria de Curso de Engenharia de Produção / Câmpus de Itapeva, sob a presidência do primeiro, a fim de proceder a arguição pública da TESE DE DOUTORADO de ARIANNE VELLASCO GOMES, intitulada **Estrutura eletrônica de cristais: Generalização mediante o Cálculo Fracionário**. Após a exposição, a discente foi arguida oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo recebido o conceito final: APROVADA. Nada mais havendo, foi lavrada a presente ata, que após lida e aprovada, foi assinada pelos membros da Comissão Examinadora.

Prof. Dr. ALEXYS BRUNO ALFONSO

Prof. Dr. EDMUNDO CAPELAS DE OLIVEIRA

Prof. Dr. JULIO RICARDO SAMBRANO

Prof. Dr. DENIS RAFAEL NACBAR

Prof. Dr. AUGUSTO BATAGIN NETO

*Dedico este trabalho a minha amada família e aos meus amigos
Rubens e Alexys que me ajudaram de forma inestimável! Vocês
tornaram meu sonho possível!*

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço a Deus, que proporcionou tal oportunidade, dando-me direcionamento e força. E por ser o verdadeiro norte da minha vida.

Agradeço ao Prof. Alexys Bruno Alfonso, pelas brilhantes discussões e pelas ideias fornecidas para a concretização deste trabalho. Agradeço pela orientação, pela confiança e incentivo demonstrados, pela paciência perante minhas dificuldades, pela disponibilidade total e simpatia que sempre manifestou ao longo deste percurso. Agradeço também as motivações e conselhos nos meus momentos de maior desânimo. Agradeço por ter sido a chave da melhoria de muitos dos meus pensamentos como profissional, e até mesmo como pessoa.

Ao Prof. Rubens de Figueiredo Camargo pela coorientação e pelos conhecimentos compartilhados, durante os anos de mestrado e doutorado, sempre com muita dedicação e incentivo. Agradeço pela oportunidade de convivência e amizade que se firmou, com grande admiração, ao longo deste trabalho.

À Profa. Emília de Mendonça Rosa Marques por ter me encorajado a fazer pós-graduação, dando-me auxílio sem hesitação. Por ser mais que uma orientadora de iniciação científica, sendo exemplo de pessoa e amiga.

Aos membros da banca de qualificação, Profa. Eliana Contharteze Grigoletto e Prof. Denis Rafael Nacbar, que gentilmente aceitaram o convite e que muito enriqueceram este trabalho.

Aos membros da banca de defesa, Prof. Edmundo Capelas de Oliveira, Prof. Julio Ricardo Sambrano, Prof. Denis Rafael Nacbar e Prof. Augusto Batagin Neto, pelas recomendações que nortearam a redação final desta tese.

À Stefânia Jarosz e seu orientador Jayme Vaz por permitirem acesso antecipado à dissertação de mestrado “Equação de Schrödinger Fracionária para Potenciais Delta”, Campinas, 2016.

À Universidade Estadual Paulista (Unesp, Bauru), ao Departamento de Matemática e ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia dos Materiais (POSMAT), pela oportunidade e condições para realizar estudos em nível de doutorado.

À CAPES por ter financiado a pesquisa.

Aos docentes e alunos do departamento de Matemática da Unesp e do Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia dos Materiais, de Bauru, pelos anos de companheirismo e incentivo profissional.

Aos meus pais, Adriana Vellasco e Marcio Roberto Gomes por me ensinarem quais os verdadeiros valores da vida. Por terem sido exemplos de superação e dedicação. Pela paciência e incentivo durante toda a minha jornada estudantil e profissional. A vocês sou eternamente grata.

À minha irmã Andreza Vellasco Gomes pelos dias de companheirismo e amor.

À minha vó Cleide L. Lucatto por se preocupar comigo e por estar presente em minha vida.

Aos meus sogros, Elza dos Santos Souza Alves e Luis Carlos Alves, por serem pessoas exemplares e pelo incentivo.

Agradeço, em especial, ao meu marido Wellington Alves, que torna meus dias mais alegres, sendo meu porto seguro de carinho, por ter me dado apoio, por toda a sua capacidade de compreensão e pelo companheirismo. Agradeço por todo o amor e dedicação, que foi essencial para a finalização do presente trabalho.

À todos que por um descuido não mencionei.

Divido com vocês a alegria e experiência.

Não conseguiria sozinha! Obrigada a todos!

“O homem é confinado nos limites estreitos do corpo, como numa prisão, mas a matemática o liberta e o faz maior do que todo o universo... É levado pela tempestade das paixões a um canto e a outro, sem nenhuma meta, mas a matemática lhe restitui a paz interior, resolvendo harmoniosamente os movimentos opostos a alma e reconduzindo-a, sob a orientação da razão, ao acordo e à harmonia.”

P. Ramo

Vellasco-Gomes, A. **Estrutura eletrônica de cristais: Generalização mediante o Cálculo Fracionário**. 152f. 2018. Tese (Programa de Pós-graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais), UNESP, Bauru, 2018.

RESUMO Tópicos fundamentais da estrutura eletrônica de materiais cristalinos, são investigados de forma generalizada mediante o Cálculo Fracionário. São calculadas as bandas de energia, as funções de Bloch e as funções de Wannier, para a equação de Schrödinger fracionária com derivada de Riesz. É apresentado um estudo detalhado do caráter não local desse tipo de derivada fracionária. Resolve-se a equação de Schrödinger fracionária para o modelo de Kronig-Penney e estuda-se os efeitos da ordem da derivada e da intensidade do potencial. Verificou-se que, ao passar da derivada de segunda ordem para derivadas fracionárias, o comportamento assintótico das funções de Wannier muda apreciavelmente. Elas perdem o decaimento exponencial, e exibem um decaimento acentuado em forma de potência. Fórmulas simples foram dadas para as caudas das funções de Wannier. A banda de energia mais baixa mostrou-se estar relacionada ao estado ligado de um único poço quântico. Sua função de onda também apresentou decaimento em lei de potência. As bandas de energia superiores mudam de comportamento em função da intensidade do potencial. No caso inteiro, a largura de cada uma dessas bandas diminui. No caso fracionário, diminui inicialmente e depois volta a aumentar, aproximando-se de um valor finito à medida que a intensidade do potencial tende ao infinito. O grau de localização das funções de Wannier, expresso pelo desvio padrão da posição, mostra um comportamento similar ao da largura das bandas de energia. Além dos cristais perfeitos a Ciência de Materiais estuda cristais com defeito. Os defeitos são responsáveis por muitas propriedades de interesse tecnológico e podem induzir estados localizados. Neste trabalho, é calculado o estado localizado de menor energia no modelo de Kronig-Penney fracionário com defeito, mediante método das transformadas de Fourier e das funções de Wannier. Verificou-se que este estado também decai em forma de lei de potência.

Palavras-chave: equação de Schrödinger fracionária, função de Wannier, comportamento assintótico, derivada de Riesz, Cálculo Fracionário, estado localizado.

Velasco-Gomes, A. **Electronic structure of crystal: generalization through Fractional Calculus**. 152p. 2018. Thesis (Graduate Program in Science and Technology of Materials). UNESP, Bauru, 2018.

ABSTRACT Basics topics on the electronic structure of crystalline materials are investigated in a generalized fashion through Fractional Calculus. The energy bands, the Bloch and Wannier functions for the fractional Schrödinger equation with Riesz derivative are calculated. The non-locality of the Riesz fractional derivative is analyzed. The fractional Schrödinger equation is solved for the Kronig-Penney model and the effects of the derivative order and the potential intensity are studied. It was shown that moving from the integer to the fractional order strongly affects the asymptotic behavior of the Wannier functions. They lose the exponential decay, gaining a strong power-law decay. Simple formulas have been given for the tails of the Wannier functions. A close relation between the lowest energy band and the bound state of a single quantum well was found. The wavefunction of the latter decays as a power law. Higher energy bands change their behavior as the periodic potential gets stronger. In the integer case, the width of each one of those bands decreases. In the fractional case, it initially decreases and then increases. The width approaching a finite value as the strength tends to infinity. The degree of localization of the Wannier functions, as expressed by the position standard deviation, behaves similarly to the width of the energy bands. In addition to perfect crystals, Materials Science studies defective crystals. Defects are responsible for many properties of technological interest and can induce localized states. In this work, the localized state of lowest energy in the fractional Kronig-Penney model with defect is calculated through of the Fourier transform method and the Wannier functions. It was shown that it decays as a power law.

Keywords: fractional Schrödinger equation, Wannier functions, Asymptotic Behavior, Riesz derivative, Fractional Calculus, localized state.

Sumário

Sumário	x
1 Introdução	13
2 Fundamentos	22
2.1 Equação de Schrödinger	22
2.1.1 Interpretação da função de onda	23
2.2 Funções de Bloch e funções de Wannier	24
2.2.1 Funções de Bloch	24
2.2.2 Funções de Wannier	26
2.3 Modelo de Kronig-Penney	27
2.4 Derivada de Riesz	27
2.4.1 Propriedades da derivada de Riesz	28
2.5 Equação de Schrödinger fracionária	29
2.5.1 Equação de Schrödinger fracionária unidimensional	30
3 Não localidade da derivada fracionária de Riesz	31
3.1 Resultados	31
3.1.1 Função constante no intervalo $[-1, 1]$	31
3.1.2 Função parabólica no intervalo $[-1, 1]$	34
3.2 Gráficos das derivadas fracionárias de Riesz	37
3.2.1 Função constante no intervalo $[-1, 1]$	38
3.2.2 Função parabólica no intervalo $[-1, 1]$	40
3.3 Conclusões sobre a não localidade	41

4	Funções de Wannier da equação de Schrödinger fracionária	44
4.1	Modelo de Kronig-Penney fracionário	45
4.1.1	Bandas de energia	45
4.1.2	Funções de Wannier	53
4.2	Resultados e discussões	59
4.3	Análise da influência da intensidade do potencial	72
4.4	Conclusões sobre o modelo de Kronig-Penney fracionário	75
5	Modelo de Kronig-Penney fracionário com defeito	78
5.1	Cálculo dos estados localizados mediante transformada de Fourier	79
5.1.1	Resultados numéricos para os níveis de energia	84
5.1.2	Resultados numéricos para as funções de onda	85
5.2	Cálculo dos estados localizados mediante funções de Wannier	88
5.2.1	Resultados numéricos para os níveis de energia	90
5.3	Comparação entre os dois métodos	91
5.4	Conclusão sobre o modelo de Kronig-Penney fracionário com defeito	93
6	Conclusões e Perspectivas	95
A	Análise de Fourier	98
A.1	Série de Fourier	98
A.1.1	Forma complexa da série de Fourier	98
A.2	Transformada de Fourier	99
B	Autovalores e autovetores	101
B.1	Autovalores e autovetores	102
B.1.1	Polinômio característico	103
B.1.2	Multiplicidade dos autovalores	103
B.2	Diagonalização de operadores	104
B.2.1	Matrizes Semelhantes	104
B.2.2	Diagonalização	104
B.3	Transformações hermitianas	105
C	Delta de Dirac e degrau de Heaviside	107
C.1	<i>Função</i> delta de Dirac	107

C.1.1	Propriedades da delta de Dirac	107
C.1.2	Delta de Kronecker	108
C.2	Função de Heaviside	109
C.3	Função Heaviside \times função delta de Dirac	109
D	Poço delta na equação de Schrödinger fracionária de Riesz	110
E	Solução do modelo de Kronig-Penney de ordem inteira	115
F	Aceleração da série $G(\epsilon, \kappa, \xi)$	120
F.1	Funções de Lerch	121
F.2	Aplicação da função zeta de Lerch	122
F.3	Testes de convergência	124
F.4	Conclusões sobre a aceleração de convergência	127
G	Soma exata da série $G(\epsilon, \kappa, \xi)$ para o caso inteiro	128
H	Demonstrações auxiliares	130
H.1	Ortonormalização das funções de Bloch	130
H.2	Existência da função de Bloch	131
H.3	Ortonormalização das funções de Wannier	132
H.4	Equivalência entre duas definições da derivada de Riesz	132
H.5	Propriedades da derivada de Riesz	135
H.6	Limite de $G(\epsilon(\kappa), \kappa, \xi)$ quando $\epsilon \rightarrow -\infty$	138
H.7	Possíveis simetrias das funções de Bloch	139
I	Comportamento assintótico das funções de Wannier	141
	Referências Bibliográficas	144

Capítulo 1

Introdução

A Ciência e Tecnologia dos Materiais tem caráter multidisciplinar, pois compartilha objetivos e metodologias com as Ciências Exatas, Engenharias e outras áreas como a Biologia. Tem como objetivo principal compreender as relações da composição e a estrutura dos materiais com as propriedades físicas e químicas destes, juntamente com a busca por aplicações tecnológicas mediante a modificação e combinação de diferentes tipos de materiais [1]. Dentre as modalidades de pesquisa destacam-se as técnicas experimentais e as modelagens e simulações teóricas, com amplo uso de ferramentas numéricas e computacionais. O uso de simulações é importante, tanto no que tange à verificação da teoria, quanto no auxílio à compreensão e previsão de fenômenos físicos, otimizando tempo e custos laboratoriais [2].

Os diferentes tipos de materiais podem ser classificados como cristalinos ou não-cristalinos, de acordo com o arranjo de seus átomos, íons ou moléculas. Os materiais cristalinos são caracterizados pela organização periódica dos átomos [3, 4] (ver item (a) da Figura 1.1). Muitos materiais metálicos e cerâmicos são classificados como sólidos cristalinos [3, 4].

Nesta tese optou-se por se estudar sistemas cristalinos por sua importância tecnológica e pela sua simplicidade estrutural. Dentre os materiais não-cristalinos estão classificados os cristais com defeitos e os materiais amorfos. Os sólidos amorfos possuem ordem de curto alcance associada às ligações químicas. Porém, de forma global, as posições atômicas são bastante aleatórias [5] (ver item (b) da Figura 1.1). Como casos intermediários entre os cristais e os amorfos estão os quase-cristais. Eles são caracterizados por uma ordem não periódica dos átomos [5] (ver item (c) da Figura 1.1). Exibem picos de difração

de raios-X similares aos dos cristais, mas com simetrias de rotação proibidas para os materiais periódicos [5]. Esse é o caso da estrutura com simetria icosaédrica, descoberta por Shechtman *et al.* [5], em 1984 .

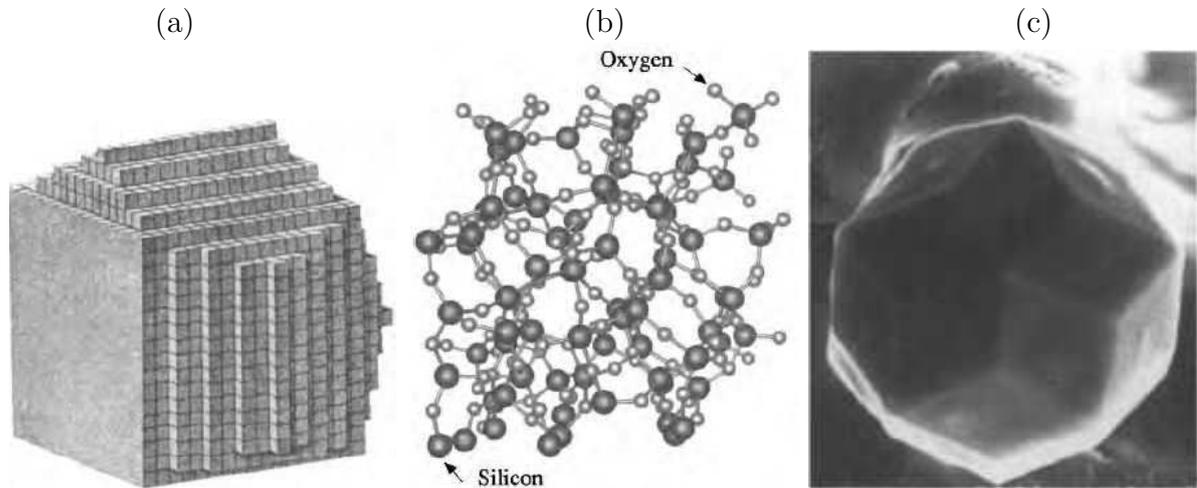


Figura 1.1: Ilustração dos diferentes tipos de materiais. Em (a) têm-se a primeira imagem publicada da estrutura de um material cristalino, o óxido de cobre vermelho, Cu_2O . Em (b) representação do SiO_2 amorfo. Em (c) imagem do quase-cristal (liga AlLiCu). Figuras extraídas da referência [5].

Os movimentos dos elétrons e núcleos, nos materiais cristalinos são descritos mediante a equação de Schrödinger. Na Mecânica Quântica, esta equação descreve a evolução temporal da função de onda que representa o estado de cada sistema de partículas. Dado a complexidade envolvida nas várias interações existentes, na tentativa de se obter soluções para a equação de Schrödinger, diferentes simplificações e aproximações são em geral empregadas. Em materiais cristalinos a aproximação adiabática (de Bohr-Oppenheimer) permite separar os movimentos dos elétrons e dos núcleos [6, 7]. A aproximação monoelétrica permite resolver o problema eletrônico mediante a equação de Schrödinger para uma única partícula em um potencial periódico [6, 7]. As soluções estacionárias desta equação são dadas pelas bandas de energia e as funções de Bloch. Tanto as bandas quanto as funções de Bloch dependem do vetor de onda, com a periodicidade da rede recíproca da rede cristalina. Essas funções formam uma base ortonormal do espaço vetorial de funções de onda da partícula e, além disso, representam estados eletrônicos estendidos. De fato, o módulo quadrado da função de onda é uma função periódica da posição do elétron, de modo que todas as células unitárias do cristal são equiprováveis para a partícula.

As funções de Bloch receberam o nome do físico suíço Felix Bloch [1905-1983] [8]. Este as introduziu em 1929, ao publicar, na revista *Zeitschrift für Physik*, o artigo ‘Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern’. Felix Bloch recebeu o Prêmio

Nobel de Física de 1952, juntamente com Edward Mills Purcell e colaboradores, pelas contribuições sobre ressonância magnética nuclear [9]. Como a função de Bloch de cada banda é periódica em relação ao vetor de onda, pode-se representá-la por uma série de Fourier. Cada um dos coeficientes da série é uma função de Wannier [10–12].

As funções de Wannier foram introduzidas em 1937, pelo físico suíço Gregory Hugh Wannier [1911-1983] [13] em seu artigo ‘*The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals*’, publicado na revista *Physical Review*. Entretanto, foi apenas a partir dos anos 90, de acordo com Ribeiro [14], que a função de Wannier começou a ganhar maior destaque na literatura. Muitos pesquisadores têm se dedicado ao estudo de suas propriedades e aplicações [15–20]. As funções de Wannier também formam uma base do espaço vetorial de funções de onda eletrônicas. No entanto, as funções de Wannier são localizadas, pois decaem na medida em que a posição da partícula tende ao infinito. Em algumas situações, a base de funções de Wannier é mais conveniente do que a base de funções de Bloch. Por exemplo, isso acontece quando algum defeito do cristal produz estados eletrônicos espacialmente localizados.

É importante notar que a dependência das funções de Bloch com o vetor de onda não é univocamente determinada pelas condições matemáticas que as definem. De fato, elas podem ser multiplicadas por funções complexas com módulo igual a um, que dependam periodicamente do vetor de onda, gerando funções equivalentes. No entanto, essa multiplicação afeta os coeficientes de Fourier, isto é, as funções de Wannier. Dessa maneira, as funções de Wannier herdam a falta de unicidade das funções de Bloch. Portanto, é possível escolher o fator de multiplicação de modo que as funções de Wannier sejam de máxima localização. Convém ressaltar que a mudança das funções de Bloch para as funções de Wannier é motivada pela procura de uma base de funções localizadas. Dado que a propriedade de localização é essencial para as funções de Wannier, é natural escolher aquelas que apresentam máxima localização [21]. Em aplicações das funções de Wannier é necessário calcular integrais de produtos de funções de Wannier centradas em pontos diferentes. O decaimento exponencial garante que as integrais tendam a zero rapidamente à medida que aumenta a distância entre os centros.

Muitos esforços têm sido dedicados ao longo de décadas à otimização das funções de Wannier. A seguir apresentamos alguns trabalhos de notório destaque. Em 1959, Kohn publicou na revista *Physical Review* o artigo ‘*Analytic Properties of Bloch Waves and*

Wannier Functions' [10], que trata de potenciais unidimensionais com simetria de inversão e do decaimento exponencial das funções de Wannier. Em 1991, Pedersen *et al.* publicaram na revista *Physical Review B* o artigo '*Wannier functions for the Kronig-Penney model*' [16], enfatizando que as escolhas de fase estão conectadas com o grau de localização da função de Wannier. Em 1997, Marzari e Vanderbilt publicaram, na revista *Physical Review B* [21], o artigo '*Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands*', em que discutem um método numérico para calcular as funções de Wannier generalizadas de localização máxima em sólidos cristalinos. Em 2001, He e Vanderbilt publicaram, na revista *Physical Review Letters*, o artigo '*Exponential decay properties of Wannier functions and related quantities*' [17], detalhando o comportamento assintótico das funções de Wannier. Em 2012, Nacbar e Bruno-Alfonso publicaram, na revista *Physical Review B*, o artigo '*Analytical optimization of spread and change of exponential decay of generalized Wannier functions in one dimension*' [22,23], que apresenta um método exato para obter as funções de Wannier generalizadas para bandas consecutivas em um cristal com simetria de inversão.

As funções de Bloch e de Wannier estão associadas à equação de Schrödinger, que é uma equação diferencial parcial de segunda ordem. Portanto, uma maneira de generalizar a teoria é considerar uma versão da equação de Schrödinger em que as derivadas sejam de ordem diferente de 2. De maneira geral, busca-se generalizar as teorias por diversas razões, dentre as quais se destacam: a consideração de fatores eventualmente negligenciados na teoria usual e uma melhor compreensão da teoria existente.

Em modelagem através de equações diferenciais, o assim chamado Cálculo Fracionário, que é o ramo da Matemática que estuda derivadas e integrais de ordem não inteira, desempenha um papel de enorme destaque [24–28]. Em especial, no que diz respeito ao objeto central deste trabalho, derivadas de ordem não inteira têm sido utilizadas para expressar os operadores de Mecânica Quântica, com uma série de novidades em relação aos operadores usuais [25, 26]. Uma das motivações para o uso de métodos do Cálculo Fracionário para a resolução de problemas da Mecânica Quântica e da Ciência de Materiais é a possibilidade de incluir os efeitos principais de alguns tipos de interação na ordem de uma derivada fracionária. Esse tipo de abordagem tem sido feita, por exemplo, com o oscilador harmônico. Na Ref. [29] é mostrado que o efeito dos diferentes tipos de atrito, nesse oscilador, pode ser obtido mudando-se a ordem da derivada, sem serem incluídos

explicitamente na equação diferencial.

O Cálculo Fracionário tem muitas versões em que a derivada é definida de formas não equivalentes, tais como as propostas de Liouville, Riemann, Riemann-Liouville, Caputo, Grünwald-Letnikov, Weyl, Riesz, Canavati, Katugampola, dentre outros [28,30,31]. A definição adotada nesta tese é aquela proposta pelo matemático Marcel Riesz, em 1948. Suas definições ficaram conhecidas como integral fracionária de Riesz e derivada fracionária de Riesz [32].

Em dezembro de 1926, o físico teórico Erwin Schrödinger [33] publicou, na revista *Physical Review* [34], a equação que leva seu nome. Trata-se de uma equação de onda, baseada na teoria ondulatória proposta por L. de Broglie, para descrever o movimento dos elétrons. Em 2002, Laskin [35] propôs uma versão fracionária da equação de Schrödinger tridimensional, na qual o operador de energia cinética tem a forma da derivada fracionária de Riesz. Nesse artigo, Laskin apresenta uma discussão sobre a equação de Schrödinger fracionária e a versão usual, que é de ordem 2. Utilizando integrais por trajetórias, que fazem parte da formulação de Feynmann para a Mecânica Quântica, mostrou que as trajetórias de Lévy levam à versão fracionária, da mesma maneira que as trajetórias brownianas levam à equação de Schrödinger. Além disso, aplica a equação de Schrödinger fracionária e encontra o espectro de energia e o raio da órbita de um átomo de hidrogênio.

Um aspecto muito importante do cálculo fracionário é que, em contraste com o cálculo tradicional, as derivadas usualmente são não locais [29, 36, 37]. Entende-se por derivada local aquela cuja existência e valor em um ponto arbitrário independem dos valores que a função toma fora de uma vizinhança arbitrariamente pequena do ponto [27]. A derivada fracionária de Riesz de ordem α , denotada por D^α , é dada em termos de uma integral da função sobre a reta real. Daí pode-se subtender o seu caráter não local. Entretanto, para $\alpha = 2$ verifica-se que a derivada é local. Neste trabalho mostra-se através de exemplos, que a derivada é não local quando α não é inteiro [38].

A importância da não localidade da derivada fracionária tem sido debatida em relação com as soluções da equação de Schrödinger fracionária [25, 35, 39, 40]. Uma versão unidimensional desta equação foi resolvida por Dong e Xu [41]. Eles lidaram com poços quânticos e potenciais periódicos, colocando ênfase em potenciais baseados na *função* delta de Dirac, *i.e.*, no modelo Kronig-Penney [42–44]. Entre poços quânticos consecutivos eles expressaram a função de onda como combinação linear de soluções conhecidas para

uma partícula livre na reta real. Depois aplicaram condições de fronteira apropriadas nos poços. Entretanto, como apontado por Jeng *et al.* [39], ao resolver equações com derivadas fracionárias espaciais, não é correto conectar as soluções gerais de intervalos vizinhos. Isso ocorre porque é preciso levar em consideração a não localidade da derivada fracionária [26]. Tem havido bastante controvérsia sobre a consistência do tratamento local da equação fracionária de Schrödinger [45]. Bayın [46, 47] insistiu na sua validade, enquanto Hawkins e Schwarz [48] e Luchko [40] reafirmaram a necessidade de uma abordagem não local.

Levando em consideração a não localidade da derivada fracionária Capelas de Oliveira *et al.* [25], usaram a transformada de Fourier para resolver analiticamente a equação de Schrödinger fracionária para potenciais delta simples e duplos. Tare e Esguerra [45] trataram de múltiplos poços quânticos, usando uma abordagem semelhante. Além disso, Jarosz [26] derivou recentemente uma equação simples para as bandas de energia e uma expressão para o coeficiente de transmissão do modelo de Kronig-Penney fracionário para uma impureza simples.

Nosso objetivo é utilizar a equação de Schrödinger fracionária desenvolvida por Laskin para estudar novas propriedades das funções de Bloch e de Wannier, assim como aplicações das mesmas. Para simplificar considera-se um caso unidimensional conhecido como modelo de Kronig-Penney [16, 49, 50]. Fazemos uma análise detalhada dos efeitos da ordem da derivada e da intensidade do potencial nas bandas de energias, nas funções de Bloch e nas funções de Wannier. Em particular, analisamos como o valor da ordem das derivadas afeta as propriedades de localização das funções de Wannier. Numa segunda etapa é abordado o modelo de Kronig-Penney com defeito. O cálculo de estados localizados é feito por dois métodos: (i) por transformada de Fourier, que tem realação com as Refs. [25, 26] e (ii) por funções de Wannier.

O modelo de Kronig-Penney de ordem inteira trata de um potencial periódico unidimensional. Foi introduzido por R. de L. Kronig e W. G. Penney em 1931 [49]. Inicialmente, eles discutiram potenciais constantes por pedaços, com uma barreira e um poço por período [49]. Em seguida discutem o caso limite, no qual a largura do poço tende a zero e sua profundidade tende ao infinito [49]. Neste caso, o potencial periódico é uma soma de deltas de Dirac, conhecida como pente de Dirac. Adotamos este modelo nesta tese. Livros-texto da área apresentam este modelo como protótipo de um cristal em que

a equação de Schrödinger tem solução simples [5, 51].

O modelo de Kronig-Penney de ordem fracionária foi investigado por Stefânia Jarosz em sua dissertação de mestrado [26]. Ela resolveu a equação pelo método da transformada de Fourier. Para potencial periódico obteve uma equação para as bandas de energia. De forma alternativa, em nosso trabalho, para potencial periódico, combinamos o teorema de Bloch com séries de Fourier.

O modelo de Kronig-Penney com defeito para a ordem inteira, $\alpha = 2$, foi introduzido em 1949 por Saxon e Hutner [52]. Eles utilizam dois métodos para tratar de uma impureza simples: função de Green e método da matriz de espalhamento. Stéslicka e Sengupta [53] desenvolvem uma técnica, para impurezas, mais simples e direta que a de Saxon e Hutner. Resolvem o problema para um potencial composto de barreiras (poços) de potencial positivo (negativo), e apresentam uma comparação entre os casos. Outros autores têm estudado o problema de impurezas em um cristal unidimensional [54–57]. A referência [26] também apresenta alguns resultados para o modelo de Kronig-Penney com defeito. Aqui apresentamos novos resultados para os estados localizados desse problema.

A estrutura deste trabalho se dá em forma de capítulos e apêndices. Na figura 1.2 são mostrados os principais conceitos e cálculos apresentados na tese, assim como os capítulos que contém os resultados mais relevantes. No Capítulo 2 são estudados os conceitos e métodos do Cálculo Fracionário, de Mecânica Quântica e Física do Estado Sólido que fundamentam esta pesquisa. Apresenta-se as propriedades da derivada de Riesz, para $1 < \alpha \leq 2$, de acordo com a Ref. [35]. Também apresenta-se a equação de Schrödinger de ordem inteira e fracionária, o modelo de Kronig-Penney e os conceitos relacionados às funções de Bloch e de Wannier.

No Capítulo 3, faz-se um estudo da não-localidade da derivada de Riesz mediante a aplicação a duas famílias de funções paramétricas. A intenção é demonstrar e ilustrar graficamente o caráter não-local da derivada fracionária. Adicionalmente, são apresentados os gráficos das derivadas destas funções, para diferentes valores da ordem de derivação. O conteúdo desse capítulo foi apresentado no Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional, realizado na Unesp, Câmpus Bauru, em 2016.

Levando em consideração a não-localidade da derivada de Riesz, no Capítulo 4 resolvemos a equação de Schrödinger fracionária para o modelo de Kronig-Penney. Calculamos de forma analítica e numérica as bandas de energia e as funções de Bloch e de Wan-

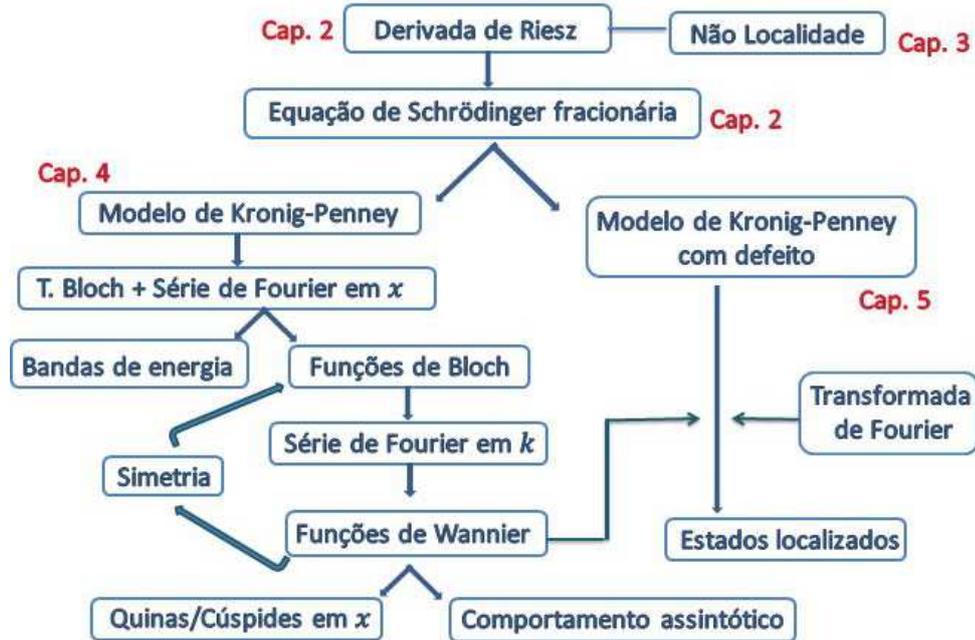


Figura 1.2: Organograma de conceitos, cálculos e capítulos da tese.

nier. Os resultados desse capítulo mostram novas propriedades dessas funções para o caso fracionário e foram apresentados XXXVI Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, realizado em Gramado/RS no ano de 2016. Recentemente, foram submetidos para publicação.

No Capítulo 5, apresenta-se um estudo do modelo de Kronig-Penney com defeito. O defeito é gerado ao modificar a intensidade do potencial de um dos poços quânticos. Faz-se um estudo mediante dois métodos: transformada de Fourier e funções de Wannier. Variou-se a ordem da derivada de Riesz e a intensidade do potencial no defeito, a fim de estudar os níveis de energia dos estados localizados e as funções de onda do primeiro estado localizado. Por fim, é feita uma comparação dos resultados dos métodos para o primeiro estado localizado e é analisado o comportamento assintótico do mesmo.

Nos apêndices apresentamos conceitos e demonstrações que fundamentam alguns resultados do trabalho. No Apêndice A, tem-se um breve apanhado sobre a teoria de séries de Fourier e das Transformadas de Fourier. No Apêndice B, tem-se um texto sucinto sobre autovalores e autovetores. No Apêndice C, apresentamos os principais conceitos sobre a *função* Delta de Dirac, a Delta de Kronecker e a Função de Heaviside. No Apêndice D, resolvemos o caso do poço delta na equação de Schrödinger fracionária de Riesz. Nesse Apêndice, com o objetivo de adaptar as notações e unidades, revisitamos um problema cuja resolução está disponível na Ref. [25]. No Apêndice E, resolvemos o modelo

de Kronig-Penney de ordem inteira, tipicamente encontrado em livros textos, no sentido de estabelecer paralelos com nossos resultados. No Apêndice F, é apresentado um estudo sobre a aplicação da função Zeta de Lerch para acelerar a convergência de uma série bi-infinita que tem grande importância para os cálculos numéricos dos Capítulos 4 e 5. O trabalho desse apêndice foi apresentado no Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional, realizado na Unesp, Câmpus Bauru, em 2017. No Apêndice G, apresentamos o cálculo da soma exata da série do Apêndice F para o caso inteiro. No Apêndice H, concentramos várias demonstrações que são mencionadas no decorrer da tese. Por fim, no Apêndice I, é apresentado cálculos auxiliares para o comportamento assintótico das funções de Wannier.

Capítulo 2

Fundamentos

Neste capítulo, a fim de estabelecer bases teóricas para os seguintes, introduz-se a equação de Schrödinger e alguns fundamentos da Física do Estado Sólido, tais como a função de Bloch e a função de Wannier. Também são apresentados tópicos de Cálculo Fracionário.

Na Seção 2.1 apresenta-se a equação de Schrödinger de ordem inteira e a interpretação da função de onda. Na seção 2.2 apresenta-se a relação das funções de Bloch com o vetor de onda k e com o índice de banda j . Além disso apresenta-se as funções de Wannier, por meio das séries de Fourier, e suas propriedades. Na Seção 2.4 apresenta-se a teoria da derivada fracionária de Riesz e suas propriedades para a ordem da derivada no intervalo $1 < \alpha \leq 2$. Por fim, na Seção 2.5 apresenta-se a equação de Schrödinger fracionária unidimensional.

2.1 Equação de Schrödinger

A equação Schrödinger tridimensional dependente do tempo [58, 59], tem a forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, z, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x, y, z, t) + V(x, y, z) \Psi(x, y, z, t), \quad (2.1)$$

onde $\hbar = h/(2\pi) \approx 1.054 \times 10^{-34}$ J·s é a constante de Planck reduzida, m é a massa da partícula e $\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ é o operador Laplaciano. Essa equação descreve a evolução temporal da função de onda $\psi(x, y, z, t)$, a partir do conhecimento da energia potencial, $V(x, y, z)$ [58].

Há sistemas em que o movimento da partícula em uma das direções, que denotamos

por x , fica desacoplado do movimento das outras. Nessas condições o movimento em x é descrito pela equação de Schrödinger unidimensional

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t). \quad (2.2)$$

2.1.1 Interpretação da função de onda

A função de onda pode assumir valores complexos, e o seu módulo ao quadrado tem uma interpretação física importante [60–62]. Aqui a exposição é feita para o caso unidimensional. Max Born [1882 - 1970] propôs que a densidade de probabilidade, $P(x,t)$, em um instante t , de se encontrar a partícula numa vizinhança do ponto x é dada pelo quadrado do módulo da função de onda [63]. Ele recebeu o prêmio Nobel em 1954 por esta proposta. A probabilidade de encontrar a partícula no intervalo $[x, x + dx]$ é dada por:

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2dx, \quad (2.3)$$

onde Ψ^* é o complexo conjugado de Ψ . A probabilidade de se encontrar a partícula em algum lugar é exatamente igual a 1, ou seja,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2dx = 1. \quad (2.4)$$

Esta é conhecida como condição de normalização da função de onda. A afirmação vale para estados localizados da partícula [60–62].

Geralmente é útil considerar os estados estacionários da partícula, *i.e.*, independente do tempo. Eles são representados por funções de onda da forma

$$\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x), \quad (2.5)$$

em que E é a energia e $\psi(x)$ é a parte espacial, que satisfaz

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (2.6)$$

Esta é chamada de equação de Schrödinger unidimensional estacionária (independente do

tempo). Ela pode ser escrita na forma

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (2.7)$$

em que

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2.8)$$

é o operador hamiltoniano usual.

2.2 Funções de Bloch e funções de Wannier

Nesta seção apresenta-se as principais propriedades das funções de Bloch e das funções de Wannier. Elas são fundamentais para o desenvolvimento dos demais capítulos.

2.2.1 Funções de Bloch

Seja $V(x)$ o potencial unidimensional de uma partícula numa rede cristalina. Ele satisfaz $V(x+a) = V(x)$, onde x é a posição e a é o período da rede. Nosso objetivo nesta seção é encontrar soluções da equação de Schrödinger para este potencial periódico [64].

As soluções mais simples da Eq. (2.7) são dadas pelo seguinte teorema.

Teorema de Bloch: Se o potencial $V(x)$ é periódico com período a , ou seja, $V(x+a) = V(x)$, então os autovetores¹ de \hat{H} podem ser identificados por um índice k tal que [7]

$$\psi_k(x+a) = e^{ika}\psi_k(x). \quad (2.9)$$

Para cada k , o operador \hat{H} tem infinitos autovetores que são chamados funções de Bloch e podem ser enumerados pelo índice inteiro j . Portanto, as funções de Bloch são denotadas por $\psi_{j,k}(x)$ e os autovalores correspondentes por $E_j(k)$. A enumeração é feita de modo que, se $j' > j$, tem-se $E_{j'}(k) \geq E_j(k)$. Fixando j , o valor $E_j(k)$ cobre um intervalo fechado ou faixa. Com isso a função $E_j(k)$ é chamada de j -ésima banda [7].

A Eq. (2.9) mostra que a translação da função de Bloch em um período a gera a própria função multiplicada por uma constante e^{ika} . Dado que esta constante tem módulo 1, a multiplicação afeta somente o argumento (ou fase) da função de Bloch. Percebe-se que a função de Bloch não é periódica, exceto para $k = 2\pi n/a$, com n sendo inteiro. Como

¹O Apêndice B traz um texto sobre autovalores e autovetores.

a dependência da função de Bloch com k vem do fator e^{ika} , que é periódico com período $2\pi/a$, as bandas satisfazem

$$E_j \left(k + \frac{2\pi}{a} \right) = E_j(k). \quad (2.10)$$

A enumeração das bandas faz com que $\psi_{j,k+\frac{2\pi}{a}}(x)$ e $\psi_{j,k}(x)$ sejam linearmente dependentes, e portanto, representem o mesmo estado quântico. Convenientemente [50], escolhe-se que a constante de proporcionalidade seja 1, ou seja,

$$\psi_{j,k+\frac{2\pi}{a}}(x) = \psi_{j,k}(x). \quad (2.11)$$

Trabalharemos com k no intervalo $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$, que é chamada de primeira zona de Brillouin na Física do Estado Sólido² [7].

A condição de Bloch, na Eq. (2.9), adicionando o índice j , fica na forma:

$$\psi_{j,k}(x+a) = e^{ika}\psi_{j,k}(x). \quad (2.12)$$

Esta, pode ser escrita de uma maneira alternativa. Multiplicando ambos os lados por $e^{-ik(x+a)}$ obtemos

$$e^{-ik(x+a)}\psi_{j,k}(x+a) = e^{-ikx}\psi_{j,k}(x).$$

Portanto, definindo $u_{j,k}(x) = e^{-ikx}\psi_{j,k}(x)$, chegamos em

$$u_{j,k}(x+a) = u_{j,k}(x).$$

Conclui-se que a Eq. (2.12) equivale a

$$\psi_{j,k}(x) = e^{ikx}u_{j,k}(x), \quad (2.13)$$

em que $u_{j,k}(x)$ é uma função periódica de x com período a . Por esta razão é chamada parte periódica da função de Bloch. Por conta desta equivalência, é possível enunciar o teorema de Bloch utilizando a Eq. (2.13) ao invés da condição na Eq. (2.9) [7].

A função de Bloch tem a seguinte propriedade, chamada condição de ortonormaliza-

²A célula primitiva de Wigner-Seitz da rede recíproca é conhecida como a primeira zona de Brillouin [7].

ção³, que será relevante para a próxima subseção [50]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{j,k}^*(x) \psi_{j',k'}(x) dx = \frac{2\pi}{a} \delta_{j,j'} \delta(k' - k), \quad (2.14)$$

onde $k' - k$ está na primeira zona de Brillouin. Na Eq. (2.14), o primeiro símbolo delta denota o delta de Kronecker e o segundo denota o delta de Dirac.

2.2.2 Funções de Wannier

Da Eq. (2.11), temos que a função de Bloch tem período $2\pi/a$ na variável k . Com isso, podemos reescrever a função de Bloch pela série de Fourier⁴ [7]

$$\psi_{j,k}(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} w_{j,n}(x) e^{ikna}, \quad (2.15)$$

em que \mathbb{Z} é o conjunto de números inteiros. O coeficiente de Fourier da função $\psi_{j,k}(x)$,

$$w_{j,n}(x) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{-ikna} \psi_{j,k}(x) dk, \quad (2.16)$$

é a função de Wannier correspondente à j -ésima banda e ao índice n da série de Fourier.

Para a j -ésima banda, as funções de Wannier de valores diferentes de n se diferenciam apenas em um deslocamento horizontal. Basta calcular a função $w_j(x) = w_{j,0}(x)$ para cada banda⁵, pois

$$w_{j,n}(x) = w_j(x - na). \quad (2.17)$$

O índice n enumera as cópias de $w_j(x)$, do mesmo jeito que n permite enumerar as células unitárias do cristal. Portanto, costuma-se associar uma função de Wannier a cada célula do cristal.

As funções de Wannier formam um conjunto ortonormal, isto é⁶ [12],

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w_{j,n}^*(x) w_{j',n'}(x) dx = \delta_{j,j'} \delta_{n,n'}. \quad (2.18)$$

³Sua demonstração encontra-se no Apêndice H.1.

⁴No Apêndice A há um texto sucinto sobre séries de Fourier.

⁵Mediante a Eq. (2.16) pode-se demonstrar a propriedade (2.17). Tal demonstração encontra-se na Ref. [50].

⁶Sua demonstração encontra-se no Apêndice H.3.

2.3 Modelo de Kronig-Penney

O modelo de Kronig-Penney de ordem inteira trata de um potencial periódico unidimensional. Em física do estado sólido é utilizado para explicar aspectos essenciais da estrutura eletrônica de cristais [51]. Foi introduzido em 1931 por R. de L. Kronig e W. G. Penney [49]. Esses autores discutem dois casos: (i) com potenciais constantes por pedaços, com uma barreira e um poço por período e (ii) o caso limite, no qual a largura do poço tende a zero e sua profundidade tende ao infinito [49]. Neste caso, o potencial periódico é uma soma de deltas de Dirac, conhecida como pente de Dirac. Nesta tese a análise é restrita ao caso limite, no qual a energia potencial é dada por

$$V(x) = V \sum_{m \in \mathbb{Z}} \delta\left(\frac{x}{a} - m\right). \quad (2.19)$$

Aqui V é a intensidade de cada poço delta localizado na posição m , com $m \in \mathbb{Z}$, enquanto a é o espaçamento entre dois poços vizinhos. A partícula é livre, exceto nas posições $x = ma$, onde sente uma barreira (poço) quando $V > 0$ ($V < 0$). No apêndice E apresenta-se uma solução do modelo de Kronig-Penney de ordem inteira.

2.4 Derivada de Riesz

A derivada de Riesz de ordem α [25], denotada por D^α , para $1 < \alpha \leq 2$, de cada função $\psi(x)$ definida na reta real, é dada por

$$D^\alpha \psi(x) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} |k|^\alpha \phi(k) dk, \quad (2.20)$$

em que

$$\phi(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \psi(x) dx = \mathcal{F}(\psi(x)) \quad (2.21)$$

é a transformada de Fourier de $\psi(x)$ e k é um vetor de onda. O sinal negativo na Eq. (2.20) faz com que o valor da derivada seja oposto àquele adotado nas Refs. [25, 35, 39, 40]. Esse sinal permite que o valor da derivada de ordem inteira, $\alpha = 2$, seja recuperado, ou seja,

$$D^2 = \frac{d^2}{dx^2}. \quad (2.22)$$

Além disso, para os exemplos investigados nesta tese, a Eq. (2.20) produz os mesmos resultados que a definição usada na Ref. [27]. Uma demonstração de equivalência entre as duas definições se encontra no Apêndice H.4.

Usando a transformada de Fourier, a derivada de Riesz pode ser escrita de forma semelhante à da Ref. [65]. Isto é,

$$D^\alpha \psi(x) = -(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} \psi(x) = -\mathcal{F}^{-1}(|k|^\alpha \mathcal{F}(\psi(x))), \quad (2.23)$$

em que

$$\mathcal{F}^{-1}(\psi(x)) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \phi(k) dk, \quad (2.24)$$

define a transformada de Fourier inversa.

2.4.1 Propriedades da derivada de Riesz

Adotando $f(x)$ e $g(x)$ como funções deriváveis segundo Riesz e considerando c e s como constantes, tem-se as seguintes propriedades da derivada de Riesz, que são demonstradas no Apêndice H:

- **Transformada de Fourier**

$$\mathcal{F}(D^\alpha \psi(x)) = -|k|^\alpha \mathcal{F}(\psi(x)). \quad (2.25)$$

- **Linearidade**

$$D^\alpha [cf(x) + sg(x)] = cD^\alpha f(x) + sD^\alpha g(x). \quad (2.26)$$

- **Derivada da exponencial**

$$D^\alpha e^{ikx} = -|k|^\alpha e^{ikx}, \text{ para } \alpha > 0. \quad (2.27)$$

- **Derivada de uma constante**

$$D^\alpha c = 0, \text{ para } \alpha > 0. \quad (2.28)$$

- **Derivada do seno**

$$D^\alpha \text{sen}(kx) = -|k|^\alpha \text{sen}(kx), \text{ para } k \neq 0. \quad (2.29)$$

- **Derivada do cosseno**

$$D^\alpha \cos(kx) = -|k|^\alpha \cos(kx), \text{ para } k \neq 0. \quad (2.30)$$

- **Não localidade**

Pelo fato da derivada ser dada através da integral na Eq. (2.21), subentende-se seu caráter não local. A questão é que ela leva em consideração o comportamento da função em toda a reta real. Isto proporciona uma forma de modelar para efeitos de memória e propriedades hereditárias [28, 66].

Entretanto, verifica-se que $D^2\psi(x) = \psi''(x)$ é uma derivada local. Isso põe em dúvida o caráter não local de D^α para os valores fracionários de α . No Capítulo 3 são apresentados exemplos em que a não-localidade é verificada.

- **Lei dos expoentes**

Neste trabalho precisamos da lei dos expoentes para o caso particular

$$D^\alpha D^2\psi(x) = -D^{\alpha+2}\psi(x). \quad (2.31)$$

- **Operação inversa da integral**

$$D^{-\alpha} f(x) = I^\alpha f(x), \quad (2.32)$$

em que o lado direito representa a integral fracionária de Riesz. Este resultado concorda com a integral fracionária definida por Hermann [27].

2.5 Equação de Schrödinger fracionária

Há versões da equação de Schrödinger fracionária que envolvem derivadas fracionárias em relação ao tempo e ao espaço. Também há versões unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais [40, 67–71]. Neste trabalho é investigado o caso unidimensional com derivada de primeira ordem em relação ao tempo e derivada fracionária de Riesz em relação à posição.

2.5.1 Equação de Schrödinger fracionária unidimensional

A equação de Schrödinger fracionária estacionária é dada por

$$-C_\alpha D^\alpha \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (2.33)$$

onde C_α é um coeficiente constante, $V(x)$ é o potencial e D^α é a derivada fracionária de Riesz apresentada na Seção 2.4. A Eq. (2.33) é da forma da Eq. (2.8), com

$$\hat{H} = \hat{K} + V(x). \quad (2.34)$$

Agora, a energia cinética tem a forma

$$\hat{K} = -C_\alpha D^\alpha. \quad (2.35)$$

A constante pode ser escrita na forma

$$C_\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_0 l^{2-\alpha}}, \quad (2.36)$$

com m_0 e l sendo a massa da partícula e um comprimento constante, respectivamente. Observa-se que D^α tem unidades de inverso de comprimento elevado a α e \hat{K} tem unidades de energia.

O caso em que $V(x)$ representa um poço infinito foi resolvido por Herrmann [72]. O caso de 1 e 2 poços delta foi resolvido por Capelas de Oliveira *et al.* [25]. Tare e Esguerra [45] trataram de múltiplos poços quânticos. E, recentemente, Jarosz [26] derivou uma equação simples para as bandas de energia do modelo de Kronig-Penney fracionário.

Nesta tese, trabalharemos inicialmente com um potencial periódico. O teorema de Bloch continua válido, mesmo que a derivada em \hat{H} seja de ordem fracionária⁷. Portanto, as funções de Bloch e de Wannier para este caso fracionário são dadas pelas mesmas expressões do caso inteiro. No entanto, algumas de suas propriedades devem depender do valor da ordem α de derivação. Isso é investigado no Capítulo 4. No Capítulo 5 é considerado um potencial não periódico. Antes de abordar a equação de Schrödinger fracionária, o próximo capítulo ilustra a não localidade da derivada fracionária de Riesz.

⁷A demonstração de existência da função de Bloch encontra-se no Apêndice H.2.

Capítulo 3

Não localidade da derivada fracionária de Riesz

Neste capítulo são apresentados exemplos que mostram o caráter não local da derivada fracionária de Riesz [27]. Os resultados são obtidos analiticamente e ilustrados graficamente, para $1 < \alpha < 2$. São investigadas duas famílias paramétricas de funções $\psi_b(x)$ cujos valores coincidem quando $|x| \leq 1$ ou $|x| \geq b$ e diferem para $1 < |x| < b$, em que b é um parâmetro maior que 1. Para mostrar a não localidade de D^α , é analisada a dependência de $D^\alpha \psi_b(0)$ com o valor de b .

Consideraremos duas famílias de funções contínuas na reta real, todas nulas fora de um intervalo finito centrado na origem, para garantir a convergência da transformada de Fourier. Foram escolhidas funções pares para simplificar os cálculos. As soluções apresentadas foram verificadas mediante cálculos algébricos realizados no software *Mathematica* [73]. Os gráficos foram elaborados com o auxílio do mesmo software.

3.1 Resultados

3.1.1 Função constante no intervalo $[-1, 1]$

Primeiramente é considerada uma família paramétrica denotadas por $\psi_b(x)$, da seguinte forma:

$$\psi_b(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } |x| \leq 1, \\ \frac{b-|x|}{b-1} & \text{se } 1 < |x| < b, \\ 0 & \text{se } |x| \geq b, \end{cases} \quad (3.1)$$

em que b é um parâmetro maior que 1.

Na Figura 3.1 é mostrado o gráfico de $\psi_b(x)$ no intervalo $[-6, 6]$ para (a) $b = 2$, (b) $b = 3$ e (c) $b = 5$. Observa-se que, independentemente do valor de b , a função toma o valor 1 no intervalo $[-1, 1]$. Se a derivada fracionária de Riesz fosse local, seu valor em $x = 0$ seria independente de b . Como será mostrado a seguir, isso não acontece para $1 < \alpha < 2$.

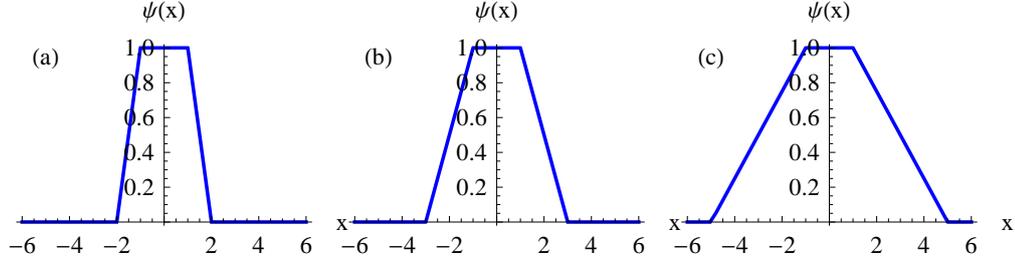


Figura 3.1: Gráfico da função $\psi_b(x)$, da Eq. (3.1), para (a) $b = 2$, (b) $b = 3$ e (c) $b = 5$.

Para calcular a derivada fracionária de $\psi_b(x)$, é preciso calcular a sua transformada de Fourier, para $k = 0$. Substituindo a Eq. (3.1) na Eq. (2.21), tem-se

$$\begin{aligned}
 \phi_b(0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i0x} \psi_b(x) dx = 2 \int_0^{\infty} \psi_b(x) dx \\
 &= 2 \int_0^1 1 dx + 2 \int_1^b \frac{b-x}{b-1} dx = 2 - \frac{1}{b-1} [(b-x)^2]_1^b \\
 &= 2 + \frac{(b-1)^2}{b-1} = 2 + b - 1 \\
 &= b + 1.
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Para $k \neq 0$, substituindo a Eq. (3.1) na Eq. (2.21), tem-se

$$\begin{aligned}
 \phi_b(k) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \psi_b(x) dx = 2 \int_0^{\infty} \cos(kx) \psi_b(x) dx \\
 &= 2 \int_0^1 \cos(kx) dx + \underbrace{\frac{2}{b-1} \int_1^b (b-x) \cos(kx) dx}_{u = b-x \text{ e } dv = \cos(kx) dx \Leftarrow v = \frac{\text{sen}(kx)}{k}} \\
 &= 2 \left[\frac{\text{sen}(kx)}{k} \right]_0^1 + \frac{2}{b-1} \left[\left[\frac{(b-x) \text{sen}(kx)}{k} \right]_1^b + \int_1^b \frac{\text{sen}(kx)}{k} dx \right] \\
 &= \frac{2 \text{sen}(k)}{k} + \frac{2}{b-1} \left[-\frac{(b-1) \text{sen}(k)}{k} - \left[\frac{\cos(kx)}{k^2} \right]_1^b \right] \\
 &= \frac{2 \text{sen}(k)}{k} - \frac{2 \text{sen}(k)}{k} + \frac{2}{b-1} \frac{(\cos(k) - \cos(kb))}{k^2} \\
 &= \frac{2[\cos(k) - \cos(kb)]}{(b-1)k^2}.
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Para obter $D^\alpha \psi_b(0)$, com $1 < \alpha < 2$, substitui-se a Eq. (3.3) na Eq. (2.20), com $x = 0$. O resultado é

$$\begin{aligned}
D^\alpha \psi_b(0) &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\alpha \phi_b(0) dx \\
&= \frac{2}{\pi(b-1)} \int_0^{+\infty} |k|^{\alpha-2} [\cos(kb) - \cos(k)] dk \\
&= \frac{2}{\pi(b-1)} \left(\frac{1}{b^{\alpha-1}} - 1 \right) \int_0^{+\infty} |k|^{\alpha-2} \cos(k) dk \\
&= \frac{2}{\pi(b-1)(\alpha-1)} \left(\frac{1}{b^{\alpha-1}} - 1 \right) \int_0^{+\infty} \cos(u^{\frac{1}{\alpha-1}}) du. \tag{3.4}
\end{aligned}$$

Aqui convém usar a fórmula 3.712.2 da Ref. [74]. Ela tem a forma

$$\int_0^\infty \cos(ax^p) dx = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{p}\right) \cos\left(\frac{\pi}{2p}\right)}{p a^{\frac{1}{p}}}. \tag{3.5}$$

Tomando $a = 1$ e $p = 1/(\alpha - 1)$, obtemos

$$\begin{aligned}
D^\alpha \psi_b(0) &= \frac{2}{\pi(b-1)(\alpha-1)} \left(\frac{1}{b^{\alpha-1}} - 1 \right) (\alpha-1) \Gamma(\alpha-1) \cos\left(\frac{\pi}{2}(\alpha-1)\right) \\
&= \frac{2}{\pi(b-1)} \left(\frac{1}{b^{\alpha-1}} - 1 \right) \Gamma(\alpha-1) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right).
\end{aligned}$$

Com isso,

$$D^\alpha \psi_b(0) = -\frac{2}{\pi} \Gamma(\alpha-1) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right) \frac{(1-b^{1-\alpha})}{b-1}, \tag{3.6}$$

sendo $1 < \alpha < 2$. No limite quando α tende a 2 a Eq. (3.6) recupera o resultado do cálculo tradicional. De fato, como a função é constante no intervalo $[-1, 1]$, a segunda derivada é nula em $x = 0$. Segundo a Eq. (3.6), no limite $\alpha \rightarrow 2$, essa anulação acontece por conta do fator $\operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)$. Já para valores de α tais que $1 < \alpha < 2$, o fator $(1-b^{1-\alpha})/(b-1)$ faz com que $D^\alpha \psi_b(0)$ varie sempre que variarmos o valor de b . Isto demonstra que a derivada é realmente não local para valores fracionários de α .

Na Figura 3.2 é mostrado o gráfico da derivada fracionária $D^\alpha \psi_b(0)$, em função do valor de b , para $\alpha \rightarrow 2.0$, $\alpha = 1.8$ e $\alpha = 1.6$. De um lado, percebe-se que para $\alpha \rightarrow 2$ o valor da derivada é independente do valor de b . Isto está relacionado com o fato da derivada de ordem inteira apresentar caráter local. Do outro lado, para $\alpha = 1.8$ e $\alpha = 1.6$, o valor da derivada de Riesz aumenta com o aumento do valor de b . Isto ilustra o caráter

não local da derivada fracionária de ordem α , para $1 < \alpha < 2$.

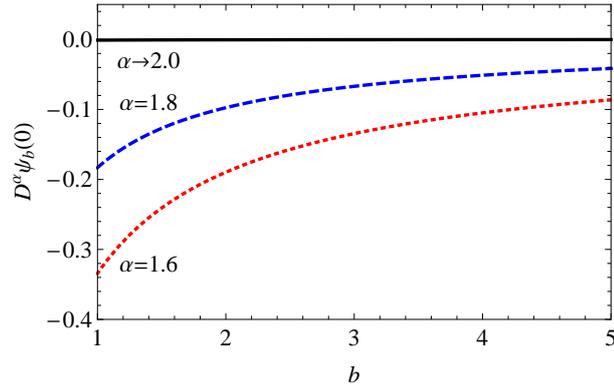


Figura 3.2: Gráfico da derivada fracionária de Riesz de ordem α , avaliada em $x = 0$, para a função $\psi_b(x)$ dada na Eq. (3.1), em função do parâmetro b . As curvas correspondem a $\alpha \rightarrow 2$ (linha contínua), $\alpha = 1.8$ (linha tracejada) e $\alpha = 1.6$ (linha pontilhada).

3.1.2 Função parabólica no intervalo $[-1, 1]$

Como segundo exemplo, todas as funções da família, denotada por $\psi_b(x)$, coincidem em seu comportamento parabólico no intervalo $[-1, 1]$ (ver Figura 3.3). A função é dada da seguinte forma

$$\psi_b(x) = \begin{cases} x^2 & \text{se } |x| \leq 1 \\ \frac{b-|x|}{b-1} & \text{se } 1 < |x| < b \\ 0 & \text{se } |x| \geq b, \end{cases} \quad (3.7)$$

em que $b > 1$.

Novamente, será mostrado o caráter não local da derivada de Riesz com ordem $1 < \alpha < 2$. Bastará provar que o valor da derivada fracionária depende do valor de b .

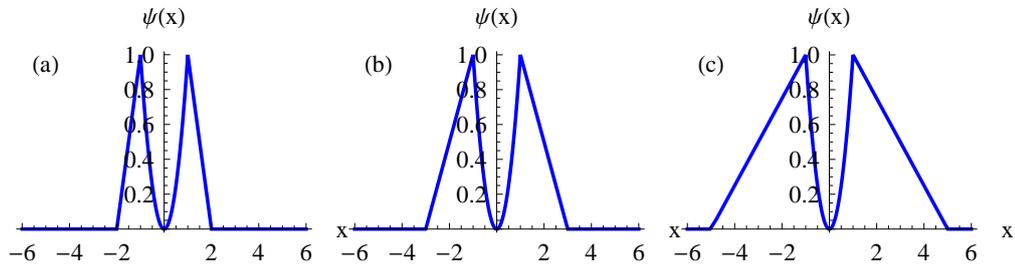


Figura 3.3: Como na Figura 3.1, mas para a função $\psi_b(x)$ dada na Eq. (3.7).

Iniciaremos calculando a transformada de Fourier de $\psi_b(x)$. Para $k = 0$, substituindo

a Eq. (3.7) na Eq. (2.21), obtemos

$$\begin{aligned}
\phi_b(0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i0x} \psi_b(x) dx = 2 \int_0^{\infty} \psi_b(x) dx \\
&= 2 \int_0^1 x^2 dx + 2 \int_1^b \frac{b-x}{b-1} dx \\
&= \frac{2}{3} [x^3]_0^1 + \frac{2}{b-1} [bx]_1^b - \frac{1}{b-1} [x^2]_1^b \\
&= \frac{2}{3} + 2b - (b+1) \\
&= b - \frac{1}{3}.
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Para $k \neq 0$, substituindo a Eq. (3.7) na Eq. (2.21), tem-se

$$\begin{aligned}
\phi_b(k) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \psi_b(x) dx \\
&= 2 \int_0^1 \cos(kx) x^2 dx + 2 \int_1^b \frac{b-x}{b-1} \cos(kx) dx,
\end{aligned} \tag{3.9}$$

para resolver utilizaremos o resultado da Seção 3.1.1. A segunda integral da Eq. 3.9 é dada

$$2 \int_1^b \frac{b-x}{b-1} \cos(kx) dx = -\frac{2 \operatorname{sen}(k)}{k} + \frac{2}{b-1} \frac{(\cos(k) - \cos(kb))}{k^2} = \Lambda. \tag{3.10}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
\phi_b(k) &= \underbrace{2 \int_0^1 \cos(kx) x^2 dx}_{u = x^2 \text{ e } dv = \cos(kx) dx \leftarrow v = \frac{\operatorname{sen}(kx)}{k}} + \Lambda \\
&= 2 \left[\left[\frac{x^2}{k} \operatorname{sen}(kx) \right]_0^1 - \underbrace{\int_0^1 \frac{2x \operatorname{sen}(kx)}{k} dx}_{u = 2x \text{ e } dv = \operatorname{sen}(kx) \leftarrow v = -\frac{\cos(kx)}{k}} \right] + \Lambda \\
&= 2 \left[\frac{\operatorname{sen}(k)}{k} + \left[\frac{2x \cos(kx)}{k^2} \right]_0^1 + \frac{1}{k} \int_0^1 \frac{2 \cos(kx)}{k} dx \right] + \Lambda
\end{aligned} \tag{3.11}$$

$$= \frac{4 \cos(k)}{k^2} - \frac{4 \operatorname{sen}(k)}{k^3} + \frac{2 \operatorname{sen}(k)}{k} + \Lambda. \tag{3.12}$$

Substituindo a Eq. (3.10) na Eq. (3.11) obtemos a transformada de Fourier, para $k \neq 0$,

ou seja,

$$\phi_b(k) = \frac{2[\cos(k) - \cos(kb)]}{(b-1)k^2} + \frac{4[k \cos(k) - \text{sen}(k)]}{k^3}. \quad (3.13)$$

A derivada fracionária de Riesz em $x = 0$ é dada por

$$\begin{aligned} D^\alpha \psi_b(0) &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\alpha \phi_b(k) dx \\ &= \frac{-1}{\pi(b-1)} \int_0^{+\infty} k^{\alpha-2} [\cos(kb) - \cos(k)] dk \\ &\quad - \frac{4}{\pi} \int_0^{+\infty} k^{\alpha-3} [k \cos(k) - \text{sen}(k)] dk. \end{aligned} \quad (3.14)$$

O primeiro termo da Eq. 3.14 já foi calculada na Seção 3.1.1. Ele é dado por

$$\Upsilon = \frac{-1}{\pi(b-1)} \int_0^{+\infty} k^{\alpha-2} [\cos(kb) - \cos(k)] dk \quad (3.15)$$

$$= -\frac{2}{\pi} \Gamma(\alpha-1) \text{sen} \left(\frac{\alpha\pi}{2} \right) \frac{(1-b^{1-\alpha})}{b-1}. \quad (3.16)$$

Assim, a derivada fracionária toma a forma

$$\begin{aligned} D^\alpha \psi_b(0) &= \Upsilon - \frac{4}{\pi} \int_0^{+\infty} k^{\alpha-3} [k \cos(k) - \text{sen}(k)] dk \\ &= \Upsilon + \frac{4}{\pi} \int_0^{+\infty} k^{\alpha-2} \cos(k) dk + \frac{4}{\pi} \int_0^{+\infty} k^{\alpha-3} \text{sen}(k) dk \\ &= \Upsilon + \frac{4}{\pi(\alpha-1)} \int_0^{+\infty} \cos(u^{1/(\alpha-1)}) dk + \frac{4}{\pi(\alpha-2)} \int_0^{+\infty} \text{sen}(u^{1/(\alpha-2)}) dk. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Aqui convém usar a Eq. 3.5 e a fórmula 3.712.1 da Ref. [74], a saber

$$\int_0^\infty \text{sen}(ax^{p'}) dx = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{p'}\right) \text{sen}\left(\frac{\pi}{2p'}\right)}{p' a^{\frac{1}{p'}}}. \quad (3.18)$$

Tomando $a = 1$, $p' = 1/(\alpha-2)$ e $p = 1/(\alpha-1)$, obtemos

$$\begin{aligned} D^\alpha \psi_b(0) &= \Upsilon + \frac{4(\alpha-1)}{\pi(\alpha-1)} \Gamma(\alpha-1) \cos\left(\frac{\pi}{2}(\alpha-1)\right) + \frac{4(\alpha-2)}{\pi(\alpha-2)} \Gamma(\alpha-2) \cos\left(\frac{\pi}{2}(\alpha-2)\right) \\ &= \Upsilon + \frac{4}{\pi} \Gamma(\alpha-1) \text{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right) + \frac{4}{\pi} \Gamma(\alpha-2) \text{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right) \\ &= \Upsilon + \frac{4}{\pi} \Gamma(\alpha-1) \text{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right) + \frac{4\Gamma(\alpha-1)}{\pi(\alpha-2)} \text{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Substituindo a Eq. (3.15) na Eq. 3.19, obtemos a derivada de Riesz para $1 < \alpha < 2$, isto é

$$D^\alpha \psi_b(0) = -\frac{2}{\pi} \Gamma(\alpha - 1) \operatorname{sen} \left(\frac{\alpha\pi}{2} \right) \frac{(1 - b^{1-\alpha})}{b - 1} + \frac{4}{\pi} \Gamma(\alpha - 1) \operatorname{sen} \left(\frac{\alpha\pi}{2} \right) + \frac{4\Gamma(\alpha - 1)}{\pi(\alpha - 2)} \operatorname{sen} \left(\frac{\alpha\pi}{2} \right), \quad (3.20)$$

que equivale a

$$D^\alpha \psi_b(0) = \frac{2}{\pi} \Gamma(\alpha - 1) \operatorname{sen} \left(\frac{\alpha\pi}{2} \right) \left[\frac{2(\alpha - 1)}{\alpha - 2} - \frac{(1 - b^{1-\alpha})}{b - 1} \right]. \quad (3.21)$$

Como ilustrado na Figura 3.4, a derivada apresenta caráter local, no limite $\alpha \rightarrow 2$. Desta vez o valor limite é 2. Para $\alpha = 1.8$ e $\alpha = 1.6$, a derivada fracionária é claramente dependente do valor de b , o que reforça a ideia de que essa derivada é não local para valores fracionários da ordem de derivação.

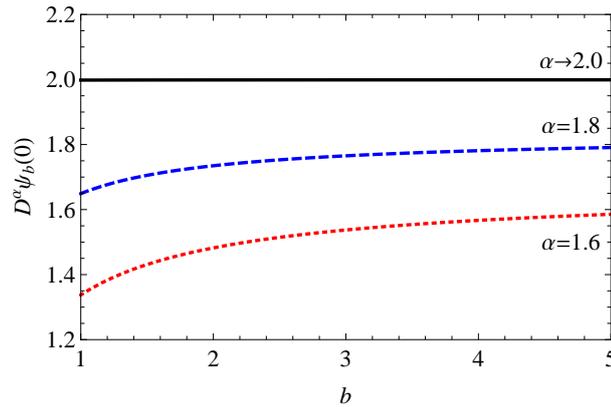


Figura 3.4: Gráfico da derivada fracionária de Riesz de ordem α , avaliada em $x = 0$, para a função $\psi_b(x)$ dada na Eq. (3.7), em função do parâmetro b . As curvas correspondem a $\alpha \rightarrow 2$ (linha contínua), $\alpha = 1.8$ (linha tracejada) e $\alpha = 1.6$ (linha pontilhada).

3.2 Gráficos das derivadas fracionárias de Riesz

Apresenta-se nesta seção gráficos da derivada fracionária de Riesz, para as funções $\psi_b(x)$ consideradas anteriormente. Os gráficos são das derivadas de ordem $\alpha = 1.999, 1.8$ e 1.6 , para três valores fixos de b : $b = 2, 3$ e 5 .

3.2.1 Função constante no intervalo $[-1, 1]$

Ao comparar os gráficos 3.5, 3.6 e 3.7 verifica-se que o gráfico de $D^\alpha \psi_b(x)$ depende de α para $-1 < x < 1$, reafirmando o caráter não local da derivada de Riesz. Além disso, independente do valor estipulado para b , o limite da derivada fracionária quando α tende a 2 assume caráter local em $x = 0$, ou seja, para uma função constante no intervalo $[-1, 1]$, $\lim_{\alpha \rightarrow 2} D^\alpha \psi(0) = 0$.

Em toda a reta real as derivadas de ordem α variam continuamente, exceto em $x = \pm 1$ e $x = \pm b$. Como mostra a Figura 3.1, a primeira derivada não está definida nesses pontos. Nas Figuras 3.5, 3.6 e 3.7, para diferentes valores de b , as funções se comportam de forma semelhante, ou seja, tendem para $+\infty$ em $x \rightarrow \pm b$ e tendem para $-\infty$ em $x \rightarrow \pm 1$.

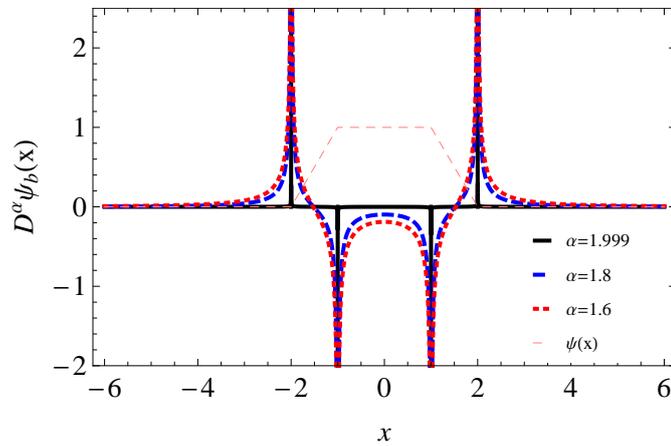


Figura 3.5: Gráfico da derivada fracionária de Riesz de ordem α da função dada na Eq. (3.1) para $b = 2$.

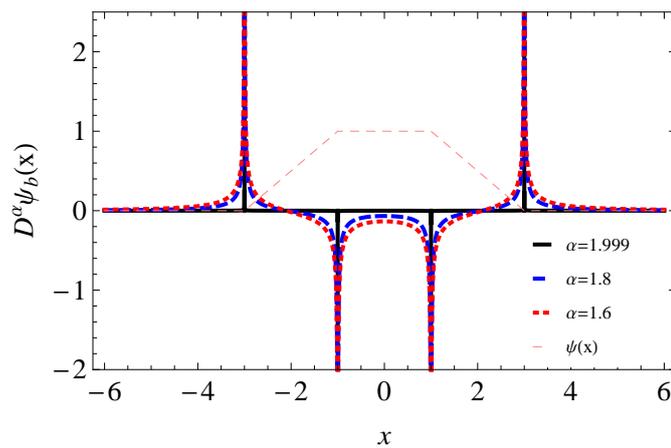


Figura 3.6: Gráfico da derivada fracionária de Riesz de ordem α da função dada na Eq. (3.1) para $b = 3$.

Com a finalidade de visualizarmos o comportamento das funções através de equações, derivamos a função $\psi(x)$, Eq. (3.1), e a reescrevemos utilizando as propriedades da função

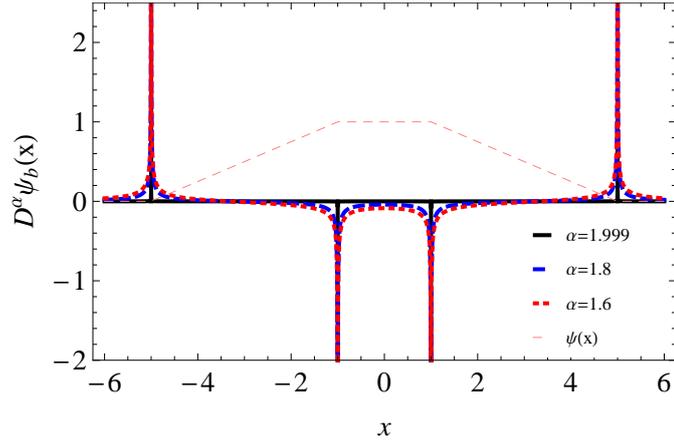


Figura 3.7: Gráfico da derivada fracionária de Riesz de ordem α da função dada na Eq. (3.1) para $b = 5$.

de Heaviside¹, ou seja,

$$\psi'(x) = \frac{1}{2(b-1)}[\Theta(x+b) - \Theta(x+1) - \Theta(x-1) + \Theta(x-b)]. \quad (3.22)$$

Daqui pode-se obter a derivada de ordem dois, utilizando as propriedades da função delta de Dirac enunciadas no Apêndice C, isto é,

$$D^2\psi(x) = \psi''(x) = \delta(x+b) - \delta(x+1) - \delta(x-1) + \delta(x-b). \quad (3.23)$$

Este resultado ajuda a compreender os picos em $x = \pm 1$ e $x = \pm b$ para $\alpha \rightarrow 2$.

Na Figura 3.5, em que $b = 2$, é mostrada uma ampliação do gráfico perto de $x = 1$. Isso permite visualizar melhor a tendência à delta de Dirac, na medida em que a ordem α se aproxima de 2.

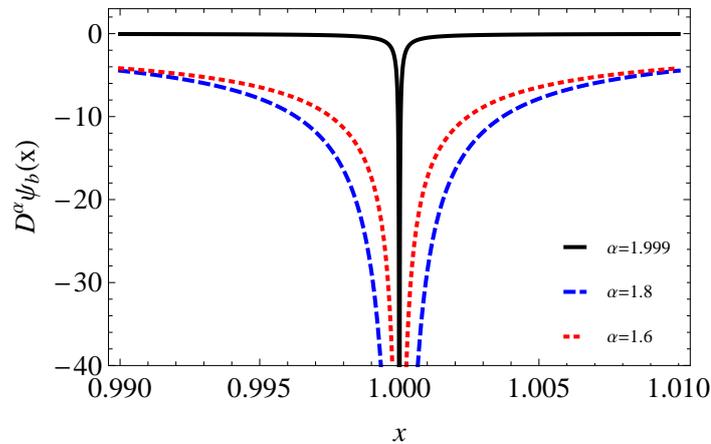


Figura 3.8: Gráfico da derivada fracionária de Riesz da função dada na Eq. (3.1) para $b = 2$, na vizinhança de $x = 1$.

¹As propriedades se encontram no Apêndice C.2.

3.2.2 Função parabólica no intervalo $[-1, 1]$

Nas Figuras 3.9, 3.10 e 3.11 verifica-se que, independente do valor estipulado para b , o limite da derivada fracionária quando α tende a 2 assume caráter local em $x = 0$, ou seja, para uma função parabólica no intervalo $[-1, 1]$, $\lim_{\alpha \rightarrow 2} D^\alpha \psi(0) = 2$.

Em toda a reta real as derivadas de ordem α variam continuamente, exceto em $x = \pm 1$ e $x = \pm b$. Nas Figuras 3.9, 3.10 e 3.11, para diferentes valores de b , as funções se comportam de forma semelhante, ou seja, tendem para $+\infty$ em $x = \pm b$ e tendem para $-\infty$ em $x = \pm 1$.

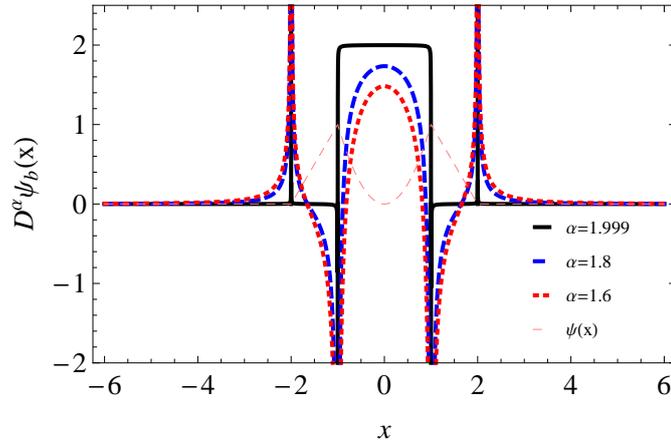


Figura 3.9: Gráfico da derivada fracionária de Riesz da função dada pela Eq. (3.7) para $b = 2$.

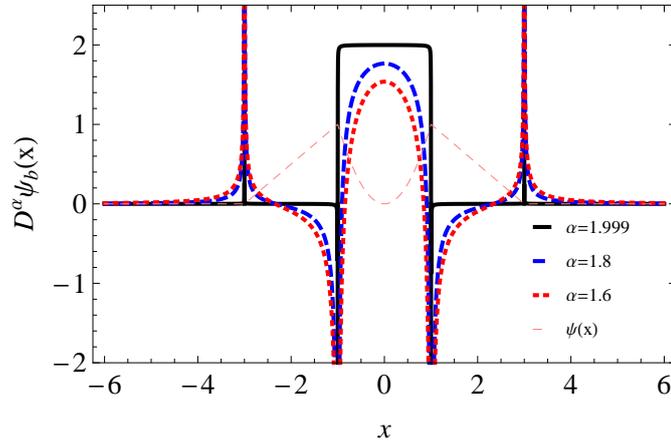


Figura 3.10: Gráfico da derivada fracionária de Riesz da função dada pela Eq. (3.7) para $b = 3$.

Com a finalidade de visualizarmos o comportamento das funções através de equações, derivamos a função $\psi(x)$, Eq. (3.7), e a reescrevemos utilizando as propriedades da função

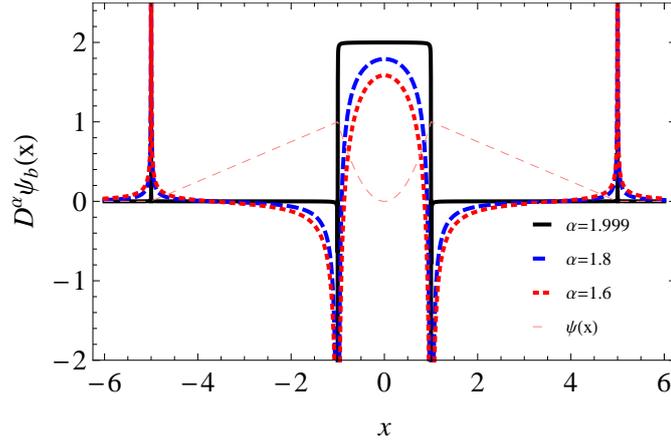


Figura 3.11: Gráfico da derivada fracionária de Riesz da função dada pela Eq. (3.7) para $b = 5$.

de Heaviside, ou seja,

$$D\psi_b(x) = \psi'_b(x) = \frac{1}{b-1}[\Theta(x-b) - \Theta(x+1) - \Theta(x-1) + \Theta(x-b)] + 2x[\Theta(x+1) - \Theta(x-1)]. \quad (3.24)$$

Desta expressão pode-se obter a derivada de ordem dois, utilizando as propriedades da função delta de Dirac enunciadas no Apêndice C. Isto é,

$$\begin{aligned} D^2\psi_b(x) = \psi''_b(x) &= \frac{\delta(x+b) - \delta(x+1) - \delta(x-1) + \delta(x-b)}{b-1} \\ &+ 2[\Theta(x+1) - \Theta(x-1)] + 2x[\delta(x+1) - \delta(x-1)] \\ &= \frac{\delta(x+b) + \delta(x-b)}{b-1} - \frac{(2b-1)[\delta(x+1) + \delta(x-1)]}{b-1} \\ &+ 2[\Theta(x+1) - \Theta(x-1)]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Para $b = 2$, nas Figuras 3.12 e 3.13, percebe-se que quando se aproxima de 2 e de 1, respectivamente, a derivada segunda assemelha-se à função delta de Dirac. A assimetria observada na Figura 3.13 é devida ao degrau de Heaviside presente na Eq. (3.25).

3.3 Conclusões sobre a não localidade

Mediante a análise de duas famílias paramétricas de funções definidas na reta real, foi demonstrado e ilustrado graficamente o fato de a derivada de Riesz ser não local, quando a ordem de derivação é fracionária. Embora a não localidade deste tipo de derivada tenha

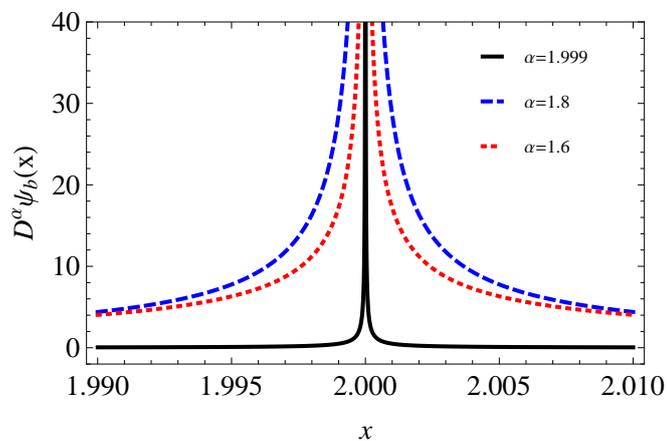


Figura 3.12: Gráfico da derivada fracionária de Riesz da função dada pela Eq. (3.7) para $b = 2$, na vizinhança de $x = 2$.

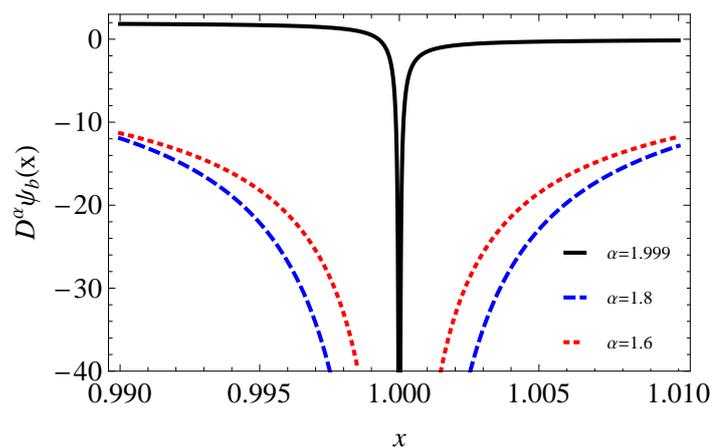


Figura 3.13: Gráfico da derivada fracionária de Riesz da função dada pela Eq. (3.7) para $b = 2$, na vizinhança de $x = 1$.

sido amplamente debatida, os exemplos apresentados devem contribuir à compreensão dessa propriedade e ao descobrimento de novas aplicações desta parte do cálculo fracionário. Adicionalmente, apresentou-se gráficos das derivadas da família paramétrica de funções, para diferentes valores da ordem de derivação. A não localidade da derivada de Riesz deve ser levada em conta em todas as aplicações, como faremos nos próximos capítulos desta tese.

Capítulo 4

Funções de Wannier da equação de Schrödinger fracionária

No presente capítulo, a equação de Schrödinger fracionária é resolvida para uma partícula em um potencial periódico unidimensional. Isto é feito, visando avaliar a dependência das bandas de energia, das funções de Bloch e das funções de Wannier com ordem α da derivada fracionária de Riesz, sendo $1 < \alpha \leq 2$. Os cálculos numéricos lidam com o potencial de Kronig-Penney.

Deve-se notar que a periodicidade do potencial simplifica o tratamento matemático do problema, em comparação com o caso de poços quânticos simples e duplos [25]. De fato, pode-se utilizar a série de Fourier, ao invés da transformada de Fourier. As bandas de energia são obtidas através de dois procedimentos: por diagonalização da matriz do operador hamiltoniano e pela solução numérica de uma equação transcendental. As funções de Bloch dependem do vetor de onda suavemente, exceto no ponto Γ . As funções de Wannier são simétricas ou antissimétricas em relação a um centro de simetria de inversão do potencial. Verifica-se que, quando $\alpha \neq 2$, as funções de Wannier não exibem um decaimento exponencial. Entretanto apresentam um forte decaimento em forma de lei de potência.

Para completar a análise, o Apêndice D apresenta a resolução para um poço delta isolado e o Apêndice E trata do modelo de Kronig-Penney de ordem inteira ($\alpha = 2$).

4.1 Modelo de Kronig-Penney fracionário

Nesta seção são apresentados os procedimentos usados para calcular as bandas de energia e as funções de Bloch. Em seguida, as funções de Wannier são introduzidas.

4.1.1 Bandas de energia

As funções de Bloch têm a forma da Eq. (2.13), sendo que a parte periódica é dada pela série de Fourier

$$u_{j,k}(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} U_n(k) f_n(x), \quad (4.1)$$

em que as funções

$$f_n(x) = \frac{e^{2\pi i n x / a}}{\sqrt{a}}, \quad (4.2)$$

com $n \in \mathbb{Z}$, formam um conjunto ortonormal sobre o período de $V(x)$. De fato, elas satisfazem

$$\int_{-a/2}^{a/2} f_n^*(x) f_{n'}(x) dx = \delta_{n,n'}. \quad (4.3)$$

A função de Bloch é normalizada à unidade na célula unitária, que é um intervalo de comprimento a , quando

$$\int_{-a/2}^{a/2} |\psi_k(x)|^2 dx = 1. \quad (4.4)$$

Combinando as Eqs. (2.13), (4.1) e (4.4) obtemos

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} |U_n(k)|^2 = 1. \quad (4.5)$$

Para encontrar a função de Bloch, deve-se determinar os coeficientes $U_n(k)$, de tal modo que

$$\hat{H} \psi_{j,k}(x) = E \psi_{j,k}(x). \quad (4.6)$$

Colocando as Eqs. (2.13) e (4.1) na Eq. (4.6), multiplicando ambos os lados por $e^{-ikx} f_n^*(x)$ e integrando no período, tem-se:

$$\sum_{n' \in \mathbb{Z}} \left[\int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx} f_n^*(x) \hat{H} e^{ikx} f_{n'}(x) dx \right] U_{n'}(k) = E \sum_{n' \in \mathbb{Z}} \left[\int_{-a/2}^{a/2} f_n^*(x) f_{n'}(x) dx \right] U_{n'}(k), \quad (4.7)$$

ou seja,

$$\sum_{n' \in \mathbb{Z}} \left[\int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx} f_n^*(x) \hat{H} e^{ikx} f_{n'}(x) dx \right] U_{n'} = E \sum_{n' \in \mathbb{Z}} U_{n'} \delta_{n,n'}. \quad (4.8)$$

Portanto, obtém-se o seguinte problema de autovalores

$$\sum_{n' \in \mathbb{Z}} H_{n,n'}(k) U_{n'}(k) = E U_n(k), \quad (4.9)$$

onde

$$H_{n,n'}(k) = \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx} f_n^*(x) \hat{H} [e^{ikx} f_{n'}(x)] dx. \quad (4.10)$$

Deve-se ter em mente que os autovalores e autovetores são funções contínuas do vetor de onda k . Estas funções são periódicas com período $2\pi/a$ e serão enumeradas pelo índice j . Isso leva às bandas de energia $E_j(k)$ e às funções de Bloch $\psi_{j,k}(x)$.

Os elementos matriciais de \hat{H} podem ser naturalmente divididos em dois termos, assim como na Eq. (2.34), isto é

$$H_{n,n'}(k) = K_{n,n'}(k) + V_{n,n'}(x), \quad (4.11)$$

onde

$$\begin{aligned} K_{n,n'}(k) &= \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx} f_n^*(x) \hat{K} [e^{ikx} f_{n'}(x)] dx \\ &= -C_\alpha \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx} f_n^*(x) D^\alpha [e^{ikx} f_{n'}(x)] dx \\ &= C_\alpha \left| k + \frac{2n\pi}{a} \right|^\alpha \delta_{n,n'} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} V_{n,n'} &= \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx} f_n^*(x) V(x) [e^{ikx} f_{n'}(x)] dx \\ &= \int_{-a/2}^{a/2} f_n^*(x) V(x) f_{n'}(x) dx \\ &= \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} V(x) e^{2(n'-n)\pi i x/a} dx. \end{aligned}$$

No intuito de simplificar as equações, pode-se introduzir a unidade de energia

$$K_\alpha = C_\alpha \left(\frac{2\pi}{a} \right)^\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_0 l^2} \left(\frac{2\pi l}{a} \right)^\alpha, \quad (4.12)$$

e as variáveis adimensionais $\xi = x/a$, $\kappa = k/(2\pi/a)$, $\epsilon(\kappa) = E(k)/K_\alpha$, $c_n(\kappa) = U_n(k)$ e

$$v_{n,n'} = \frac{V_{n,n'}}{K_\alpha} = \int_{-1/2}^{1/2} v(\xi) e^{2(n'-n)\pi\xi} d\xi, \quad (4.13)$$

onde $v(\xi) = V(a\xi)/K_\alpha$. Como resultado, a versão adimensional do problema de autovalores é

$$\sum_{n' \in \mathbb{Z}} (|\kappa + n|^\alpha \delta_{n,n'} + v_{n,n'}) c_{n'}(\kappa) = \epsilon(\kappa) c_n(\kappa). \quad (4.14)$$

A função de Bloch¹ é dada por

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \chi_\kappa(\xi), \quad (4.15)$$

com

$$\chi_\kappa(\xi) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} c_n(\kappa) e^{2\pi i(\kappa+n)\xi}. \quad (4.16)$$

Deve-se notar que, para $1 < \alpha \leq 2$, os elementos matriciais, $H_{n,n'}(k)$, são funções contínuas do vetor de onda k . Como resultado, cada autovalor $E(k)$ é uma função contínua de k . De forma que essa função satisfaz

$$E(k + 2\pi/a) = E(k), \quad (4.17)$$

i.e.,

$$\epsilon(\kappa + 1) = \epsilon(\kappa). \quad (4.18)$$

Sem perder a generalidade física, os coeficientes de Fourier de $u_k(x)$ são escolhidos para satisfazer

$$U_n(k + 2\pi/a) = U_n(k). \quad (4.19)$$

i.e.

$$c_n(\kappa + 1) = c_n(\kappa). \quad (4.20)$$

¹A fim de simplificar as expressões omitiremos, a partir deste ponto, o índice j das bandas de energia, funções de Bloch e Wannier.

Desta forma, a função de Bloch obedece

$$\psi_{k+2\pi/a}(x) = \psi_k(x), \quad (4.21)$$

como apresentado no Capítulo 2. Sua forma adimensional é

$$\chi_{\kappa+1}(\xi) = \chi_{\kappa}(\xi). \quad (4.22)$$

Neste capítulo, a análise é restrita ao modelo Kronig-Penney com energia potencial apresentada no Capítulo 2. O potencial adimensional, referente à Eq. (2.19), é dado por

$$v(\xi) = v \sum_{m \in \mathbb{Z}} \delta(\xi - m), \quad (4.23)$$

com $v = V/K_{\alpha}$. Portanto, substituindo a Eq. (4.23) na Eq. (4.13), obtemos

$$v_{n,n'} = \int_{-1/2}^{1/2} v \delta(\xi) e^{2(n'-n)\pi\xi} d\xi = v. \quad (4.24)$$

A simplicidade dos elementos de matriz $v_{n,n'}$ permite a obtenção de uma equação simples para os autovalores da Eq. (4.14). Esta equação pode ser reescrita como

$$(\epsilon(\kappa) - |\kappa + n|^{\alpha}) c_n(\kappa) = S(\kappa), \quad (4.25)$$

com

$$S(\kappa) = v \sum_{n \in \mathbb{Z}} c_n(\kappa). \quad (4.26)$$

Este tratamento tem pontos em comum com a Ref. [26].

O caso quando a intensidade do potencial é nula, ou seja, quando a partícula é livre, corresponde a $V = 0$, *i.e.*, $v = 0$. Consequentemente, vale $S(\kappa) = 0$. Com isso, as bandas de energia são obtidas, ordenando a sequência

$$(|\kappa + n|^{\alpha} : n \in \mathbb{Z}) \quad (4.27)$$

em ordem crescente. Usando o índice j inteiro não negativo, as bandas de energia de partícula livre são denotadas por $\bar{\epsilon}_j(\kappa)$.

Para o potencial não nulo ($V \neq 0$), *i.e.* $v \neq 0$, deve-se considerar dois casos. Tais casos serão nomeados de A e B.

No caso A, consideraremos que não há um inteiro n que satisfaça $\epsilon(\kappa) = |\kappa + n|^\alpha$. Então, faz-se

$$c_n(\kappa) = \frac{S(\kappa)}{\epsilon(\kappa) - |\kappa + n|^\alpha}. \quad (4.28)$$

Como a função de Bloch não é identicamente nula, por estar associada à probabilidade de encontrar a partícula, existem valores de n com $c_n(\kappa) \neq 0$. Como resultado, $S(\kappa) \neq 0$ neste caso. Combinando as Eqs. (4.26) e (4.28), obtém-se

$$\frac{S(\kappa)}{v} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{S(\kappa)}{\epsilon(\kappa) - |\kappa + n|^\alpha}. \quad (4.29)$$

Como $S(\kappa)$ não pode se anular, pode-se reescrever a equação para as bandas de energia como

$$G(\epsilon, \kappa) = \frac{1}{v}, \quad (4.30)$$

onde

$$G(\epsilon, \kappa) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{\epsilon(\kappa) - |\kappa + n|^\alpha}. \quad (4.31)$$

As propriedades desta função são apresentadas mais adiante no texto.

No caso B, consideraremos que existe um número inteiro n que satisfaz $\epsilon(\kappa) = |\kappa + n|^\alpha$. De acordo com a Eq. (4.25), neste caso vale $S(\kappa) = 0$. Isso significa que $c_n(\kappa) = 0$, exceto para um par de números inteiros n' e n'' , com $n' \neq n''$, ou seja, $c_{n'}(\kappa) + c_{n''}(\kappa) = 0$. Como a Eq. (4.25) leva a

$$\begin{cases} (\epsilon(\kappa) - |\kappa + n'|^\alpha) c_{n'}(\kappa) = 0, \\ (\epsilon(\kappa) - |\kappa + n''|^\alpha) c_{n''}(\kappa) = 0, \end{cases} \quad (4.32)$$

tem-se $\epsilon(\kappa) = |\kappa + n'|^\alpha = |\kappa + n''|^\alpha$. Este é o caso em que duas bandas de energia da partícula livre se tocam. Isto é o mesmo que

$$\kappa + n' = -(\kappa + n''), \quad (4.33)$$

i.e., $\kappa = \nu/2$, com $\nu = -(n' + n'') \in \mathbb{Z}$. De fato, se ocorresse $\kappa + n' = \kappa + n''$, implicaria em $n' = n''$, o que contradiz nossa hipótese. A energia correspondente à Eq. (4.33) é $\epsilon(\nu/2) = |\nu/2 + n'|^\alpha = |\mu/2|^\alpha$, com $\mu = n' - n'' \neq 0$. Convém notar que ν e μ têm a

mesma paridade, dado que n' e n'' são números inteiros, ou seja, sua soma e sua diferença devem ter a mesma paridade. Os valores de n são dados por

$$n' = (\mu - \nu)/2 \quad (4.34)$$

e

$$n'' = -(\mu + \nu)/2. \quad (4.35)$$

Além disso, seguindo a Eq. (4.26), eles cumprem a relação

$$c_{n'}(\nu/2) + c_{n''}(\nu/2) = 0. \quad (4.36)$$

Quando ambos os inteiros ν e μ são pares (ímpares), o vetor de onda κ é equivalente ao centro (à borda) da primeira zona de Brillouin ($-\frac{1}{2} < \kappa \leq \frac{1}{2}$, *i.e.*, $-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$). Uma vez que o caso B corresponde a um conjunto de valores isolados de κ , pode-se concluir que a forma das bandas de energia é determinada pela Eq. (4.30).

A função $G(\epsilon, \kappa)$ é dada por uma série absolutamente convergente que é diferenciável em relação a ϵ , com derivada negativa, e apresenta as propriedades

$$\lim_{\epsilon \rightarrow -\infty} G(\epsilon, \kappa) = 0, \quad (4.37)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow (|\kappa+n|^\alpha)^-} G(\epsilon, \kappa) = -\infty, \quad (4.38)$$

e

$$\lim_{\epsilon \rightarrow (|\kappa+n|^\alpha)^+} G(\epsilon, \kappa) = +\infty. \quad (4.39)$$

Isso dá uma sequência de assíntotas verticais nas energias da partícula livre $\epsilon = \bar{\epsilon}_j(\kappa)$, com $j = 0, 1, \dots$ (ver Figura 4.1). Na região $\epsilon < \bar{\epsilon}_0(\kappa)$ existe uma única solução $\epsilon_0(\kappa)$ para a Eq. (4.30), se e somente se $v < 0$. Além disso, para cada número inteiro $j = 1, 2, 3, \dots$, existe uma única solução $\epsilon_j(\kappa)$ entre $\bar{\epsilon}_{j-1}(\kappa)$ e $\bar{\epsilon}_j(\kappa)$. Desta forma, é possível procurar as energias de cada banda dentro do intervalo apropriado.

Consideremos as funções de Bloch. No caso A, substituindo a Eq. (4.28) na Eq. (4.16),

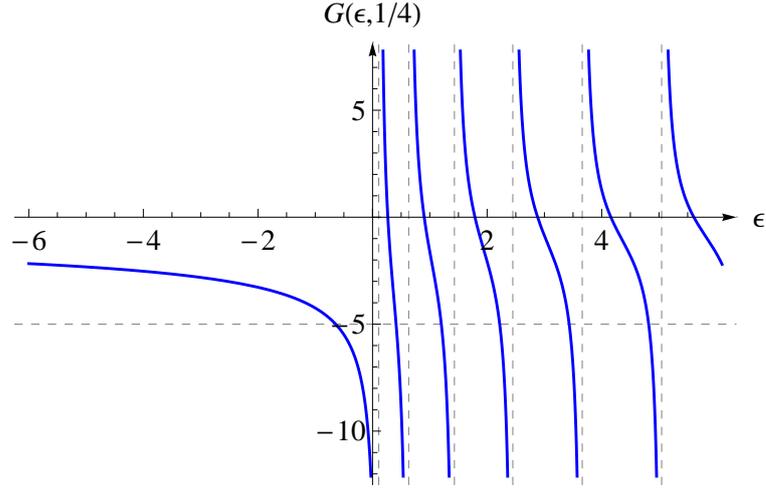


Figura 4.1: As curvas contínuas são para a função $G(\epsilon, 1/4)$, e as linhas verticais tracejadas são assíntotas do gráfico. A linha tracejada horizontal está em $1/v$, com $v = -0.2$. Suas interseções com as curvas dão os autovalores. Aqui considerou-se $\alpha = 1.6$.

a função de Bloch adimensional tem a forma

$$\chi_{\kappa}(\xi) = S(\kappa) G(\epsilon(\kappa), \kappa, \xi), \quad (4.40)$$

onde

$$G(\epsilon(\kappa), \kappa, \xi) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{2\pi i(\kappa+n)\xi}}{\epsilon(\kappa) - |\kappa + n|^{\alpha}} \quad (4.41)$$

é uma generalização da função definida pela Eq. (4.31). De fato, vale $G(\epsilon, \kappa) = G(\epsilon, \kappa, 0)$.

Combinando as Eqs. (4.5) e (4.28), a condição de normalização é dada por

$$|S(\kappa)| = \left(-\frac{\partial G}{\partial \epsilon}(\epsilon(\kappa), \kappa) \right)^{-1/2}. \quad (4.42)$$

com

$$\frac{\partial G}{\partial \epsilon}(\epsilon, \kappa) = - \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{(\epsilon - |\kappa + n|^{\alpha})^2}. \quad (4.43)$$

Vale ressaltar que, em geral, $S(\kappa)$ é uma função complexa cuja fase pode ser escolhida arbitrariamente, desde que

$$S(\kappa + 1) = S(\kappa). \quad (4.44)$$

Isso não afeta o significado físico da função de Bloch. No entanto, diferentes escolhas da fase podem levar a diferentes graus de localização da função de Wannier. A fase de $S(\kappa)$ será escolhida posteriormente, a fim de produzir funções de Wannier de máxima localização. Para isso aproveitaremos a simetria de reflexão do sistema.

No caso B, a Eq. (4.16) tem a forma

$$\chi_{\nu/2}(\xi) = c_{n'}(\nu/2) e^{2\pi i(\nu/2+n')\xi} + c_{n''}(\nu/2) e^{2\pi i(\nu/2+n'')\xi}. \quad (4.45)$$

Combinando as Eqs. (4.34), (4.35) e (4.36), obtemos

$$\chi_{\nu/2}(\xi) = c_{n'}(\nu/2) e^{2\pi i(\nu/2+\frac{\mu-\nu}{2})\xi} + c_{n''}(\nu/2) e^{2\pi i(\nu/2-\frac{\mu+\nu}{2})\xi}. \quad (4.46)$$

De acordo com a Eq. (4.36), temos que

$$\chi_{\nu/2}(\xi) = 2i c_{n'}(\nu/2) \text{sen}(\pi\mu\xi). \quad (4.47)$$

A condição de normalização, dada pela Eq. (4.5), tem a forma

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} |c_n(\nu/2)|^2 = 1, \quad (4.48)$$

que equivale a

$$|c_{n'}(\nu/2)|^2 + |c_{n''}(\nu/2)|^2 = 1. \quad (4.49)$$

Nesta última faz-se a substituição $c_{n''}(\nu/2) = -c_{n'}(\nu/2)$, de acordo com a Eq. (4.36). Isto leva a

$$|c_{n'}(\nu/2)|^2 + |-c_{n'}(\nu/2)|^2 = 1. \quad (4.50)$$

Como resultado, a condição de normalização da função de Bloch é

$$|c_{n'}(\nu/2)| = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (4.51)$$

Curiosamente, a função de onda da Eq. (4.47) se anula nos pontos onde a interação ocorre (nas posições dos deltas de Dirac). Assim, no caso B a partícula não sente a interação e sua energia,

$$\epsilon(\nu/2) = |\mu/2|^\alpha, \quad (4.52)$$

não depende da intensidade do potencial v .

4.1.2 Funções de Wannier

Como explicado no Capítulo 2, basta calcular uma função de Wannier para cada banda. Omitindo o índice j e tomando $n = 0$ na Eq. (2.16) obtemos

$$w(x) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \psi_k(x) dk. \quad (4.53)$$

Sua forma adimensional é dada por

$$\omega(\xi) = \sqrt{a} w(x) = \int_{-1/2}^{1/2} \chi_\kappa(\xi) d\kappa. \quad (4.54)$$

Vale ressaltar que a integral acima não é afetada por mudanças dos valores de $\chi_\kappa(\xi)$ em $k = 0$ e $k = \pm\pi/a$, *i.e.*, $\kappa = 0$ e $\kappa = \pm 1/2$. Portanto, os cálculos das funções de Wannier podem ser realizados mediante a Eq. (4.40).

As bandas de energia são simétricas em $k = 0$ [6], *i.e.*,

$$E(-k) = E(k), \quad (4.55)$$

e

$$\epsilon(-\kappa) = \epsilon(\kappa). \quad (4.56)$$

Além disso, $\psi_{-k}(x)$ e $\psi_k^*(x)$ são linearmente dependentes. A função de Wannier é real quando escolhemos

$$\psi_{-k}(x) = \psi_k^*(x), \quad (4.57)$$

i.e.

$$\chi_{-\kappa}(\xi) = \chi_\kappa^*(\xi), \quad (4.58)$$

ou, equivalentemente,

$$S(-\kappa) = S^*(\kappa). \quad (4.59)$$

De fato, pela Eq. (4.54), tem-se

$$\omega(\xi) = \int_0^{1/2} \chi_\kappa(\xi) d\kappa + \int_{-1/2}^0 \chi_\kappa(\xi) d\kappa, \quad (4.60)$$

fazendo a substituição $\kappa' = -\kappa$, na segunda integral, tem-se

$$\omega(\xi) = \int_0^{1/2} \chi_\kappa(\xi) d\kappa + \int_0^{1/2} \chi_{-\kappa}(\xi) d\kappa. \quad (4.61)$$

Assim, pela Eq. (4.58), obtemos

$$\omega(\xi) = \int_0^{1/2} (\chi_\kappa(\xi) + \chi_\kappa^*(\xi)) d\kappa. \quad (4.62)$$

Portanto, a função de Wannier é dada pela equação

$$\omega(\xi) = 2 \int_0^{1/2} \text{Re}(\chi_\kappa(\xi)) d\kappa. \quad (4.63)$$

O grau de localização da função de Wannier é dado geralmente pela incerteza da posição da partícula. Esse grau é expresso pelo desvio padrão, σ , dado pela raiz quadrada da variância

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x}_j)^2 |w_j(x)|^2 dx, \quad (4.64)$$

em que

$$\bar{x}_j = \int_{-\infty}^{+\infty} x |w_j(x)|^2 dx = \frac{qa}{2} \quad (4.65)$$

é o valor esperado da posição da partícula, também chamado de centro da função de Wannier. A função de Wannier possui localização máxima quando σ atinge seu valor mínimo. No presente trabalho, a otimização é realizada, escolhendo adequadamente a fase de $S(\kappa)$.

Em 1959, Kohn [10] mostrou que as funções de Wannier de máxima localização são simétricas ou antissimétricas em relação a um centro de simetria do potencial. Além disso, tais funções são reais e decaem exponencialmente quando $|x| \rightarrow \infty$. Em 2001, He e Vanderbilt [17] reportaram um fator de decaimento adicional, na forma $|x - \bar{x}|^{-3/4}$. No presente trabalho, para a equação de Schrödinger fracionária, também procuramos por funções de Wannier simétricas (pares) ou antissimétricas (ímpares), a fim de encontrar a máxima localização.

Para a análise da simetria da função de Wannier, considera-se o operador de reflexão, $\hat{\sigma}_q$, para cada centro de simetria dado por $x_q = qa/2$, onde q é um inteiro. Esse operador é dado por $\hat{\sigma}_q : x \mapsto 2x_q - x$. A operação $\hat{\sigma}_q$ transforma a função avaliada do ponto x

na função avaliada na imagem, por reflexão, de x em relação a x_q , ou seja,

$$\hat{\sigma}_q y(x) = y(2x_q - x). \quad (4.66)$$

À procura dos autovalores e autovetores de $\hat{\sigma}_q$, resolvemos

$$\hat{\sigma}_q y(x) = \lambda y(x). \quad (4.67)$$

Aplicando o operador de reflexão em ambos os lados da última equação, tem-se

$$\hat{\sigma}_q^2 y(x) = \hat{\sigma}_q (\lambda y(x)). \quad (4.68)$$

Como $\hat{\sigma}_q^2$ é o operador identidade, ou seja, $\hat{\sigma}_q^2 y(x) = y(x)$, e $\hat{\sigma}_q$ é linear, tem-se

$$y(x) = \lambda \hat{\sigma}_q y(x). \quad (4.69)$$

Substituindo a Eq. (4.67), tem-se que

$$y(x) = \lambda^2 y(x), \quad (4.70)$$

o que resulta nos autovalores $\lambda = \pm 1$. Para o autovalor $\lambda = 1$ ($\lambda = -1$), os autovetores são as funções simétricas (antissimétricas) em relação ao ponto $x = x_q$. Dessa forma, a Eq. (4.67) será dada por

$$\hat{\sigma}_q y(x) = (-1)^s y(x), \quad (4.71)$$

com $s = 0$ ($s = 1$) no caso simétrico (antissimétrico).

Como o operador de reflexão, σ_q , comuta com o hamiltoniano, \hat{H} , as funções $\psi_k(x)$ e $\psi_{-k}(\hat{\sigma}_q x)$ são soluções do mesmo problema. Isto leva aos mesmos autovalores, *i.e.*, às mesmas energias. Com isso, para cada nível de energia não degenerado, $\psi_k(x)$ e $\psi_{-k}(\hat{\sigma}_q x)$ serão linearmente dependentes, ou seja, existe um escalar λ_k tal que

$$\psi_{-k}(\hat{\sigma}_q x) = \lambda_k \psi_k(x). \quad (4.72)$$

A função de Wannier, Eq. (4.53), ao sofrer a transformação satisfaz

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_q w(x) &= w(\hat{\sigma}_q x) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \psi_k(\hat{\sigma}_q x) dk = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \psi_{-k}(\hat{\sigma}_q x) dk \\ &= \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \lambda_k \psi_k(x) dk.\end{aligned}\quad (4.73)$$

Então, $w(x)$ é simétrica ou antissimétrica em relação a $x = x_q$ quando

$$w(\hat{\sigma}_q x) = (-1)^s w(x), \quad (4.74)$$

ou seja,

$$\frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \lambda_k \psi_k(x) dk = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} (-1)^s \psi_k(x) dk. \quad (4.75)$$

Esta condição pode ser escrita na forma

$$\int_{-\pi/a}^{\pi/a} [\lambda_k - (-1)^s] \psi_k(x) dk = 0, \quad (4.76)$$

que equivale a $\lambda_k = (-1)^s$. Como resultado, tem-se

$$\psi_{-k}(\hat{\sigma}_q x) = (-1)^s \psi_k(x). \quad (4.77)$$

Considerando a Eq. (2.17), pode-se restringir a análise aos casos $q = 0$ e $q = 1$. Estes correspondem aos centros de simetria em $x_0 = 0$ e $x_1 = a/2$, respectivamente. Isso leva a quatro classes de funções de Wannier, dadas por pares da forma (q, s) , ou seja, $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$, e $(1, 1)$. Neste caso, o centro de cada função de Wannier é dado por $\bar{x} = qa/2$, *i.e.*, $\bar{\xi} = \bar{x}/a = q/2$. A Figura 4.2 ilustra a forma das funções de Wannier para os quatro tipos de simetria.

Combinando as Eqs. (4.58) e (4.77), obtém-se uma condição a ser obedecida pela função de Bloch, a saber

$$\psi_k(x) = (-1)^s \psi_k^*(\hat{\sigma}_q x). \quad (4.78)$$

De acordo com as Eqs. (2.13), (4.1), (4.40) e (4.41), isto leva a

$$S(\kappa) = (-1)^s e^{-2\pi i q \kappa} S^*(\kappa). \quad (4.79)$$

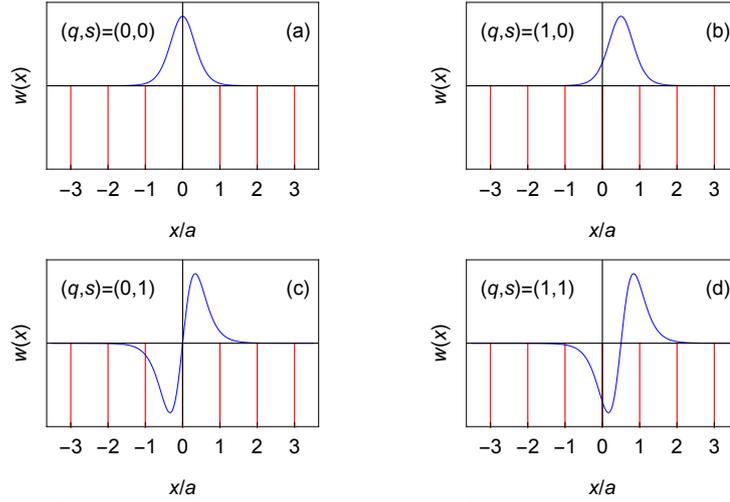


Figura 4.2: Possíveis simetrias das funções de Wannier.

Multiplicando por $S(\kappa)$ e tomando a raiz quadrada de ambos os lados, obtém-se

$$S(\kappa) = \pm i^s e^{-iq\kappa\pi} |S(\kappa)|. \quad (4.80)$$

Para $0 \leq \kappa \leq 1/2$, pode-se escolher

$$S(\kappa) = -i^s e^{-iq\kappa\pi} |S(\kappa)|. \quad (4.81)$$

Sob esta condição, as funções de Wannier serão de máxima localização.

Neste ponto, tem-se um procedimento bastante completo para obter as funções de Wannier reais e simétricas ou antissimétricas. No entanto, qual par (q, s) corresponde a cada banda ainda deve ser identificado. A Eq. (4.78) é equivalente a

$$\text{Re}(\psi_k(x)) + \text{Im}(\psi_k(x)) = (-1)^s [\text{Re}(\psi_k(\hat{\sigma}_q x)) - \text{Im}(\psi_k(\hat{\sigma}_q x))]. \quad (4.82)$$

Pode-se notar, ao se comparar a Eq. (4.74) com a Eq. (4.82), que a parte real da função de Bloch tem a mesma simetria que a função de Wannier, em relação a $x_q = qa/2$. Já a parte imaginária tem simetria oposta. Além disso, considerando as Eqs. (4.21) e (4.57), é visto que as funções de Bloch em $k = 0$ e $k = \pi/a$ são reais. Estes valores do vetor de onda são geralmente denotados como Γ e X , respectivamente. Como resultado, pode-se classificar as bandas analisando a simetria das funções de Bloch em Γ e X .

Por um lado, $\psi_0(x)$ é periódica, com período a , *i.e.*, $\psi_0(x + a) = \psi_0(x)$. Ela tem a mesma simetria em relação a $x = 0$ e $x = a/2$. Isso traz dois tipos de funções de Bloch

em Γ : Γ_1 (Γ_2) quando é simétrica (antissimétrica) em relação a ambos pontos, $x = 0$ e $x = a/2$ (ver itens (a) e (b) da Figura 4.3). Por outro lado, $\psi_{\pi/a}(x)$ é anti-periódica, com período a , *i.e.*, $\psi_{\pi/a}(x + a) = -\psi_{\pi/a}(x)$. Portanto, tem simetrias opostas em relação a $x = 0$ e $x = a/2$. Isso produz dois tipos de funções de Bloch em X : X_1 (X_2) quando é simétrico (antissimétrico) em relação a $x = 0$ e antissimétrico (simétrico) em relação a $x = a/2$ (ver itens (c) e (d) da Figura 4.3). Os itens (a), (b), (c), (d) das funções de Bloch, da Figura 4.3, correspondem numericamente aos itens (a), (c), (d) e (b), respectivamente, das funções de Wannier da Figura 4.2. Neste sentido [11, 18, 75, 76], há as quatro classes de bandas: $\Gamma_1 - X_1$, $\Gamma_2 - X_2$, $\Gamma_1 - X_2$, e $\Gamma_2 - X_1$. Quanto à classe (q, s) da função de Wannier, esses tipos correspondem a $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$, e $(1, 1)$, respectivamente.

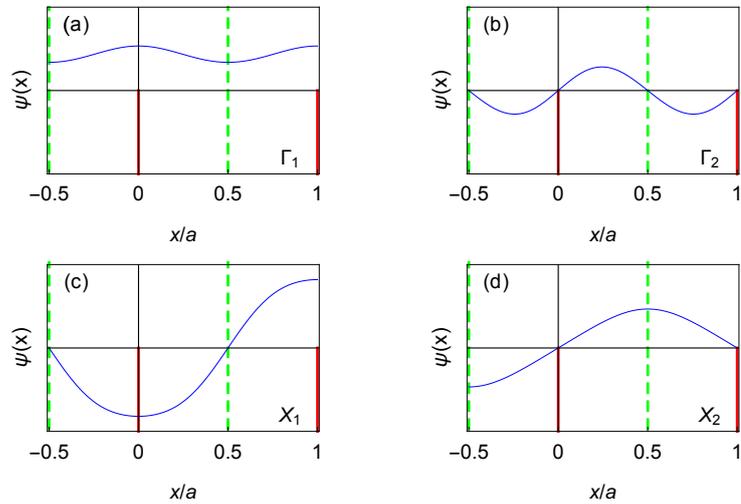


Figura 4.3: Possíveis simetrias das funções de Bloch para $\Gamma(\kappa = 0)$ e $X(\kappa = 1/2)$.

Se quisermos classificar as bandas, podemos calcular as energias e as funções de Bloch em $\kappa = 0$ e $\kappa = 1/2$. A observação do gráfico de cada função de Bloch revelará se trata de Γ_1 , Γ_2 , X_1 ou X_2 . No entanto, é possível calcular diretamente a energia para cada tipo de função de Bloch.

Os tipos Γ_1 e X_1 correspondem ao caso A, como demonstrado no Apêndice H.7. Portanto, suas energias satisfazem a Eq. (4.30). O tipo Γ_1 corresponde a

$$\frac{1}{\epsilon} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\epsilon - n^\alpha} = \frac{1}{v}, \quad (4.83)$$

com $\epsilon < 0 = \bar{\epsilon}_0(0)$ ou $\bar{\epsilon}_{j-1}(0) = (j-1)^\alpha < \epsilon < j^\alpha = \bar{\epsilon}_j(0)$, e o tipo X_1 é dado por

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\epsilon - (n + 1/2)^\alpha} = \frac{1}{2v}, \quad (4.84)$$

com $\epsilon < (1/2)^\alpha = \bar{\epsilon}_0(1/2)$ ou $\bar{\epsilon}_{j-1}(1/2) = (j - 1/2)^\alpha < \epsilon < (j + 1/2)^\alpha = \bar{\epsilon}_j(1/2)$.

Os tipos Γ_2 e X_2 correspondem ao caso B (ver Apêndice H.7). As energias deste caso, são dadas por $\epsilon(\nu/2) = (|\mu|/2)^\alpha$, em que $|\mu|$ corresponde ao índice j da banda. Trata-se do encontro das bandas de energia de índice $j - 1$ e j do elétron livre. Os tipos Γ_2 e X_2 correspondem aos valores pares e ímpares de j , respectivamente. Desta forma, pode-se classificar cada banda mediante as energias em Γ e X .

Felizmente, pode-se notar que, à medida que a energia aumenta, os tipos em Γ (X) seguem a sequência $\Gamma_1, \Gamma_1, \Gamma_2$, e repete-se sempre o último par (X_1, X_2 , repete-se sempre o último par). Portanto, a sequência de tipos de banda é $\Gamma_1 - X_1, \Gamma_1 - X_2, \Gamma_2 - X_1$, com o último par se repetindo para sempre. Isso significa que a função de Wannier da banda mais baixa, $w_0(x)$ é simétrica em relação a $x = 0$. Isto é, $(q_0, s_0) = (0, 0)$. Para $j \geq 1$, a função de Wannier da j -ésima banda é simétrica (antissimétrica), em relação a $x = a/2$, para valores ímpares (pares) de j . Em outras palavras, $(q_j, s_j) = (1, 0)$ [$(q_j, s_j) = (1, 1)$] para valores ímpares [pares, estritamente positivos] de j . Não há bandas com funções de Wannier antissimétricas em $x = 0$. É importante ressaltar que esta classificação vem da discussão do parágrafo anterior que é específico para o modelo de Kronig-Penney inteiro ou fracionário.

4.2 Resultados e discussões

Nos cálculos numéricos, as séries de Fourier nas Eqs. (4.14), (4.31), (4.40) e (4.42) devem ser aproximadas. Isto pode ser feito através de um procedimento de truncamento, *i.e.*, somando em $\mathbb{Z}_N = \{n \in \mathbb{Z} : -N \leq n \leq N\}$ ao invés de \mathbb{Z} . No entanto, a convergência das séries truncadas $G(\epsilon, \kappa, \xi)$ e $\frac{\partial G}{\partial \epsilon}(\epsilon, \kappa)$ é bastante lenta. Portanto, aceleramos a convergência, como descrito no Apêndice F. Os resultados exibidos a seguir correspondem a $N = 2048$ e $N = 128$ para as séries truncada e acelerada, respectivamente. Deve-se notar que, no caso inteiro, $\alpha = 2$, a série pode ser somada exatamente, conforme explicado no Apêndice G.

As bandas de energia para $v = -0.2$ são exibidas na Figura 4.4. Considerando a periodicidade e simetria das bandas nas Eqs. (4.18) e (4.56), os cálculos são restritos a $0 \leq \kappa \leq 1/2$. Para cada valor estritamente positivo de j , a j -ésima banda é limitada pelas bandas da partícula livre, de índices $j - 1$ e j . Essas são exibidas como linhas tracejadas

na Figura 4.4. No caso inteiro, $\alpha = 2$, a intensidade escolhida do potencial permite um acoplamento apreciável entre os poços quânticos. As curvas para cinco valores da ordem da derivada fracionária são mostradas na Figura 4.4: $\alpha = 2.0, 1.8, 1.6, 1.4$ e 1.2 . As energias dependem continuamente do vetor de onda k . Nos painéis de (a) até (c) pode-se observar um excelente acordo entre as soluções da Eq. (4.30) com convergência de série acelerada, mostrados como linhas contínuas, e os autovalores numéricos do problema da Eq. (4.14), representados pelos pontos. O acordo não é tão bom no painel (e), devido à convergência lenta dos autovalores da matriz truncada.

Para $j \geq 1$, a largura das bandas na janela de energia exibida diminui quando α diminui de 2.0 para 1.4. Neste processo, a monotonicidade de cada banda é mantida. Em contraste, de $\alpha = 1.4$ para $\alpha = 1.2$, a largura da banda de índice $j = 1$ aumenta e a monotonicidade das bandas de $j = 1$ para $j = 5$ está invertida. Isso corresponde a uma inversão da ordem entre $\epsilon_j(0)$ e $\epsilon_j(1/2)$. Quando j é ímpar, o ponto de inversão é dado pela Eq. (4.83), com $\epsilon = (j/2)^\alpha$, *i.e.*,

$$\frac{1}{(j/2)^\alpha} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{(j/2)^\alpha - n^\alpha} = \frac{1}{v}. \quad (4.85)$$

Para valores pares de j , a reversão é dada pela Eq. (4.84) com $\epsilon = (j/2)^\alpha$, ou seja,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(j/2)^\alpha - (n + 1/2)^\alpha} = \frac{1}{2v}. \quad (4.86)$$

Para $v = -0.2$, o achatamento das bandas de $j = 1$ até $j = 6$ ocorre em $\alpha_1 \approx 1.400$, $\alpha_2 \approx 1.318$, $\alpha_3 \approx 1.294$, $\alpha_4 \approx 1.277$, $\alpha_5 \approx 1.267$ e $\alpha_6 \approx 1.258$.

Nas Figuras 4.4(d) e 4.4(e), a banda mais baixa (de índice $j = 0$) está abaixo da janela de energia selecionada. O comportamento desta banda nos painéis de (a) a (c) deve ser comparado com a energia do estado ligado de um único poço quântico, no caso fracionário [25]. Como explicado no Apêndice D, esta é dada por

$$\epsilon_{qw} = - \left[-\frac{2v\pi}{\alpha} \operatorname{csc} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right) \right]^{\frac{\alpha}{\alpha-1}}. \quad (4.87)$$

A Figura 4.5(a), mostra que o nível de energia do poço quântico com intensidade $v = -0.2$ está na faixa de energia da banda mais baixa. Isso pode ser entendido em termos de acoplamento entre os poços quânticos. Para $\alpha = 1.6$, a redução do acoplamento, à medida

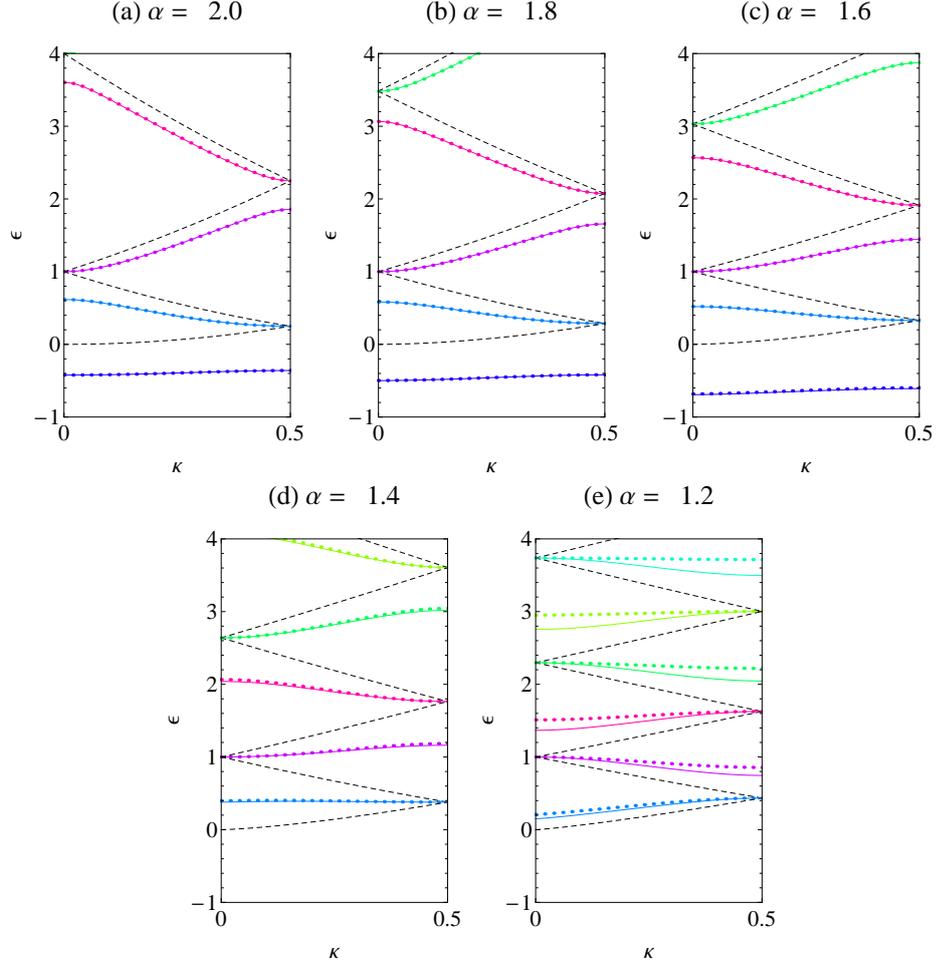


Figura 4.4: Banda de energia do modelo de Kronig-Penney com intensidade potencial de $v = -0.2$ e derivada de Riesz da ordem (a) $\alpha = 2$, (b) $\alpha = 1.8$, (c) $\alpha = 1.6$, (d) $\alpha = 1.4$ e (e) $\alpha = 1.2$. As linhas sólidas são para as soluções numéricas da Eq. (4.30) enquanto os pontos são para os autovalores numéricos da Eq. (4.14). As linhas tracejadas são as bandas de energia para uma partícula livre, *i.e.*, $v = 0$.

que a intensidade do potencial aumenta, é evidente na Figura 4.5. Quando $v \rightarrow -\infty$, a banda encolhe e, essencialmente, se reduz ao nível de energia de um poço quântico isolado.

Quanto à suavidade de cada banda, deve-se notar que, no caso inteiro, $\alpha = 2$, $\epsilon_j(\kappa)$ tem derivadas contínuas de todos as ordens inteiras. Para os casos fracionários, isso ainda acontece, exceto em Γ . Quando $\chi_{j,0}(\xi)$ é de tipo Γ_1 , a energia é essencialmente dada por

$$\epsilon_j(\kappa) \approx \epsilon_j(0) + C_\alpha |\kappa|^\alpha + C_2 \kappa^2 + C_{2\alpha} |\kappa|^{2\alpha} + C_{\alpha+2} |\kappa|^{\alpha+2} + C_4 \kappa^4 + C_{2\alpha+2} |\kappa|^{2\alpha+2}, \quad (4.88)$$

onde os coeficientes são dependentes de j . Quando $\chi_{j,0}(\xi)$ é do tipo Γ_2 , a energia é aproximada por

$$\epsilon_j(\kappa) \approx (j/2)^\alpha + C_2 \kappa^2 + C_{\alpha+2} |\kappa|^{\alpha+2} + C_4 \kappa^4 + C_{2\alpha+2} |\kappa|^{2\alpha+2}. \quad (4.89)$$

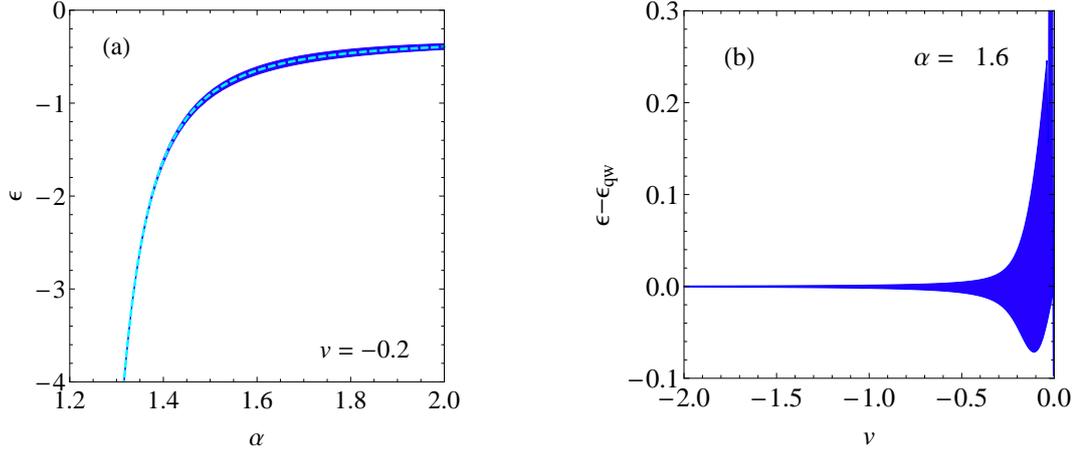


Figura 4.5: (a) As linhas contínuas são as bordas da faixa de energia mais baixa do potencial de Kronig-Penney, com $v = -0.2$, em função da ordem derivada fracionada α . A linha tracejada corresponde ao nível de energia do poço quântico ϵ_{qw} da Eq. (4.87). (b) As bordas da mesma faixa, para $\alpha = 1.6$, referente à ϵ_{qw} , em função da intensidade do potencial v .

Essa falta de suavidade das bandas pode afetar as funções de Bloch e de Wannier. Deve-se notar que a dependência de ϵ em κ^α vem do termo com $n = 0$ na Eq. (4.30). A dependência mista de ϵ com potências inteiras e fracionárias de κ é obtida, calculando a série de Taylor de ϵ em função de duas variáveis, a saber κ e $\phi = \kappa^\alpha$, perto de $(\kappa, \phi) = (0, 0)$.

As funções de Bloch $\chi_{j,\kappa}(\xi)$ também são afetadas pela ordem da derivada fracionária. A Figura 4.6 exhibe a função de Bloch da primeira banda, $j = 0$, em $\kappa = 1/4$, para diferentes valores da ordem fracionária. Os gráficos são restritos a $-1/2 \leq \xi \leq 1/2$. Fora desse intervalo, pode-se usar

$$\chi_{j,\kappa}(\xi + n) = \exp(2\pi i \kappa n) \chi_{j,\kappa}(\xi), \quad (4.90)$$

que é a versão adimensional da condição de Bloch, dada pela Eq. (2.9). Observa-se que a distribuição de probabilidade é mais concentrada nas proximidades do poço quântico quando α diminui de 2.0 para 1.2.

Deve-se notar que, quando $\epsilon_j(\kappa) \neq (j/2)^\alpha$, as funções de Bloch possuem singularidades em cada $\xi = m$, quando m é inteiro. Tal comportamento é devido às singularidades dos poços quânticos do modelo de Kronig-Penney, e sua acentuação depende da ordem da derivada fracionária. Quando $\xi \approx m$, a diferença $G(\epsilon, \kappa, \xi) - G(\epsilon, \kappa, m)$ pode ser aproximada por uma combinação linear de $|\xi - m|^{\alpha-1}$ e $(\xi - m)$. Convém notar que

$$G(\epsilon(\kappa), \kappa, m) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{2\pi i (\kappa+n)m}}{\epsilon(\kappa) - |\kappa + n|^\alpha} = e^{2\pi i \kappa m} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{\epsilon(\kappa) - |\kappa + n|^\alpha} = \frac{e^{2\pi i \kappa m}}{v}, \quad (4.91)$$

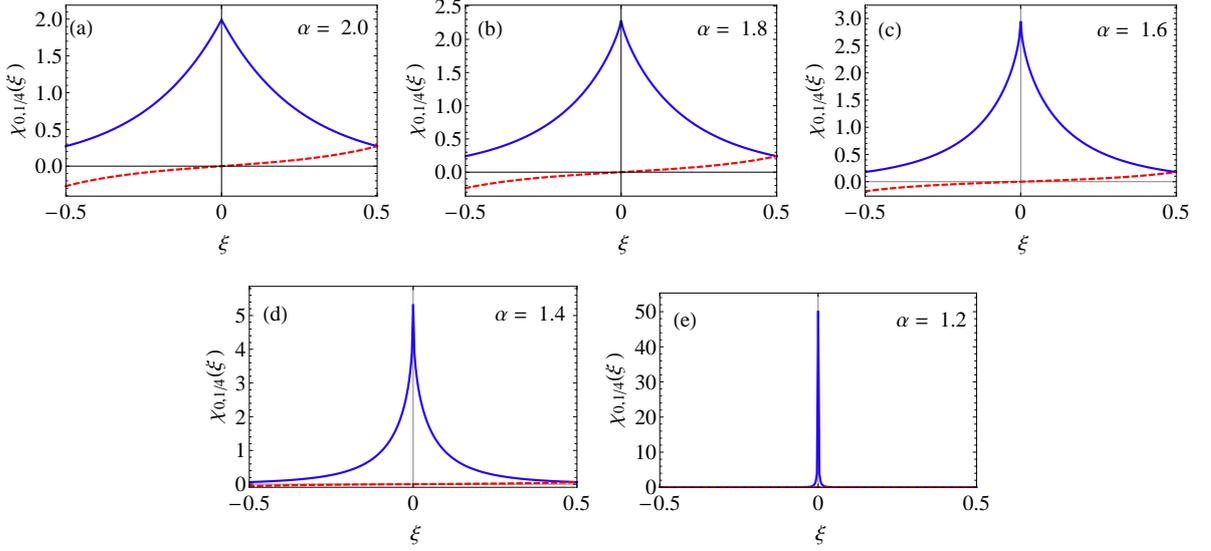


Figura 4.6: A função de Bloch em $\kappa = 1/4$ para a banda mais baixa da Figura 4.4. As partes real e imaginária são dadas pela linha sólida e a tracejada. A derivada de Riesz é de ordem (a) $\alpha = 2$, (b) $\alpha = 1.8$, (c) $\alpha = 1.6$, (d) $\alpha = 1.4$ e (e) $\alpha = 1.2$.

e, de acordo com a Eq.(4.40),

$$\chi_\kappa(m) = S(\kappa) G(\epsilon(\kappa), \kappa, m) = \frac{S(\kappa) e^{2\pi i \kappa m}}{v}. \quad (4.92)$$

Então, tem-se

$$\chi_\kappa(\xi) \approx \chi_\kappa(m) \left[1 - \frac{(2\pi)^\alpha v \sec(\pi\alpha/2) |\xi - m|^{\alpha-1}}{2\Gamma(\alpha)} + 2\pi i (\xi - m) v \eta(\kappa) \right], \quad (4.93)$$

onde

$$\eta(\kappa) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{(\kappa + n)}{\epsilon(\kappa) - (n + \kappa)^\alpha} - \frac{(n + 1 - \kappa)}{\epsilon(\kappa) - (n + 1 - \kappa)^\alpha} \right]. \quad (4.94)$$

No caso inteiro, $\alpha = 2$, a singularidade é uma quina que consiste em um salto da primeira derivada. O salto é devido ao segundo termo entre parênteses da Eq. (4.93) e lê-se

$$\frac{\partial \chi_\kappa}{\partial \xi}(m^+) - \frac{\partial \chi_\kappa}{\partial \xi}(m^-) = -\frac{(2\pi)^2 v \sec(\pi)}{\Gamma(2)} \chi_\kappa(m) = (2\pi)^2 v \chi_\kappa(m), \quad (4.95)$$

i. e.,

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial x}(ma^+) - \frac{\partial \psi_k}{\partial x}(ma^-) = \frac{(2\pi)^2 v}{a} \psi_k(ma) = \frac{Va}{C_2} \psi_k(ma). \quad (4.96)$$

Este é o efeito esperado dos deltas de Dirac que compõem o potencial $V(x)$ na Eq. (2.34) (ver Eq. (7) da Ref. [43]). Para valores de α fracionários, o mesmo termo produz uma cúspide que se acentua à medida que α diminui. O terceiro termo controla a assimetria

da quina ou cúspide.

Por conta da Eq. (4.63), a suavidade da função de Bloch em relação ao vetor de onda é de grande interesse para o estudo das funções de Wannier. No caso inteiro, $\alpha = 2$, $\chi_{j,\kappa}(\xi)$ tem derivadas contínuas de todas as ordens inteiras em κ . Com base neste fato, He e Vanderbilt [17] mostraram que $\omega_j(\xi + n)$ decai como produto de uma exponencial e uma potência de n . Mais explicitamente, quando $|n|$ é grande o suficiente, tem-se

$$\omega_j(\xi + n) \approx A_j(\xi) e^{-h_j|n|} |n|^{-3/4}, \quad (4.97)$$

quando h_j é dado pela Eq. (G.5).

No caso fracionário, $\chi_{j,\kappa}(\xi)$ herda a falta de suavidade de $\epsilon_j(\kappa)$ perto de $\kappa = 0$. Quando $\chi_{j,0}(\xi)$ é do tipo Γ_1 , o comportamento para $\kappa \rightarrow 0^+$ é

$$\begin{aligned} \chi_{j,\kappa}(\xi) \approx & \chi_{j,0}(\xi) + i I_1 \kappa + R_\alpha \kappa^\alpha + R_2 \kappa^2 + i I_{\alpha+1} \kappa^{\alpha+1} \\ & + i I_3 \kappa^3 + R_{\alpha+2} \kappa^{\alpha+2} + R_{2\alpha} \kappa^{2\alpha}, \end{aligned} \quad (4.98)$$

em que o coeficiente $\chi_{j,0}(\xi)$, R e I são reais e dependentes de j e ξ . Os expoentes de κ na parte real têm a forma $2l + m\alpha$, com l e m sendo inteiros não negativos. Aqueles na parte imaginária têm a forma $2l + 1 + m\alpha$. Na Eq. (4.98), a principal singularidade vem do termo que contém κ^α . Quando $\chi_{j,0}(\xi)$ é do tipo Γ_2 , o comportamento de $\kappa \rightarrow 0^+$ é

$$\chi_{j,\kappa}(\xi) \approx \chi_{j,0}(\xi) + i I_1 \kappa + R_2 \kappa^2 + i I_{\alpha+1} \kappa^{\alpha+1} + i I_3 \kappa^3 + R_{\alpha+2} \kappa^{\alpha+2} + R_4 \kappa^4, \quad (4.99)$$

em que $\chi_{j,0}(\xi) = -\sqrt{2} \operatorname{sen}(j\pi\xi)$. Neste caso, a principal singularidade é o termo que contém a potência $\kappa^{\alpha+1}$. Em ambos os casos, as potências inteiras de κ dão contribuições nulas. Como resultado, a função de Wannier vai decair como uma potência negativa de $|n|$ (ver apêndice I). Para $j = 0$ e para valores ímpares de j , a Eq. (4.99) leva à:

$$\omega_j(\xi + n) \approx \frac{R_\alpha \sec(\pi\alpha/2)}{2(2\pi)^\alpha \Gamma(-\alpha) |n|^{\alpha+1}}, \quad (4.100)$$

em que

$$R_\alpha = \frac{1}{2\epsilon^3(0) \left(-\frac{\partial G}{\partial \epsilon}(\epsilon(0), 0) \right)^{5/2}} \left[-G(\epsilon(0), 0, \xi) \left(2\frac{\partial G}{\partial \epsilon}(\epsilon(0), 0) + \epsilon(0) \frac{\partial^2 G}{\partial \epsilon^2}(\epsilon(0), 0) \right) + 2\epsilon(0) \frac{\partial G}{\partial \epsilon}(\epsilon(0), 0) \left(-\frac{\partial G}{\partial \epsilon}(\epsilon(0), 0) + \frac{\partial G}{\partial \epsilon}(\epsilon(0), 0, \xi) \right) \right]. \quad (4.101)$$

Para valores pares de j , com $j \geq 2$, a Eq. (4.99), leva à:

$$\omega_j(\xi + n) \approx \frac{I_{\alpha+1} \sec(\pi\alpha/2)}{2(2\pi)^{\alpha+1} \Gamma(-\alpha - 1) |n|^{\alpha+2}}, \quad (4.102)$$

em que

$$I_{\alpha+1} = -\alpha 2^{\frac{3}{2}+\alpha} j^{-(1+\alpha)} \text{sen}^2 \left(\frac{j\pi\xi}{2} \right). \quad (4.103)$$

Convém notar que R_α ou $I_{\alpha+1}$ podem se anular em valores isolados de ξ . Se isso acontecer em $\xi = \xi_0$, então uma potência de $1/|n|$ com expoente fracionário maior dominará o decaimento de $\omega_j(\xi_0 + n)$. No entanto, as Eqs. (4.100) e (4.102) serão válidas para quase todos os valores de ξ .

As funções de Wannier são calculadas pelo tratamento numérico da integral na Eq. (4.54). Ao fazê-lo, a função de Bloch é avaliada em uma malha uniforme em κ , com o passo $1/1024$. Em cada subintervalo, a função é interpolada linearmente e seu produto com $\exp(2\pi i n \kappa)$ é integrado analiticamente. Em seguida, a soma sobre os subintervalos é feita.

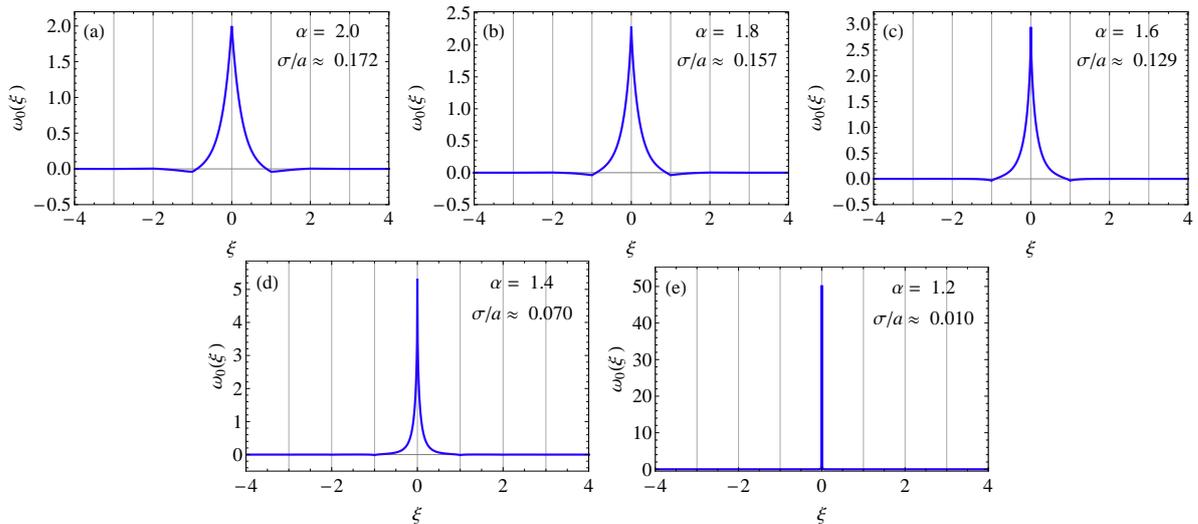


Figura 4.7: A função de Wannier da primeira banda do modelo de Kronig-Penney com intensidade $v = -0.2$ e derivada de Riesz de ordem (a) $\alpha = 2$, (b) $\alpha = 1.8$, (c) $\alpha = 1.6$, (d) $\alpha = 1.4$ e (e) $\alpha = 1.2$. As linhas verticais pontilhadas representam os poços quânticos.

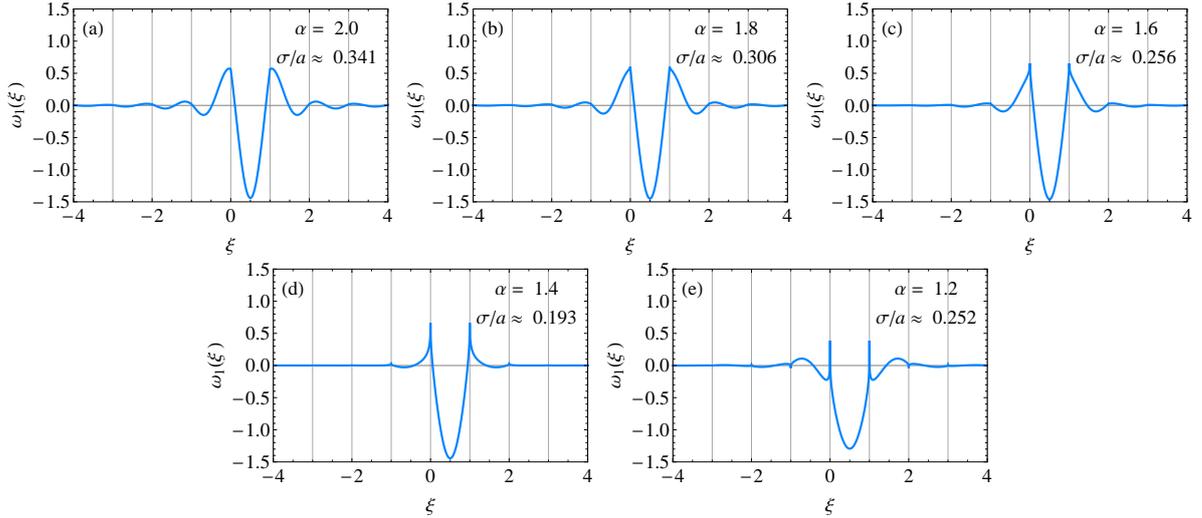


Figura 4.8: Como na Figura 4.7, mas para a banda de índice $j = 1$.

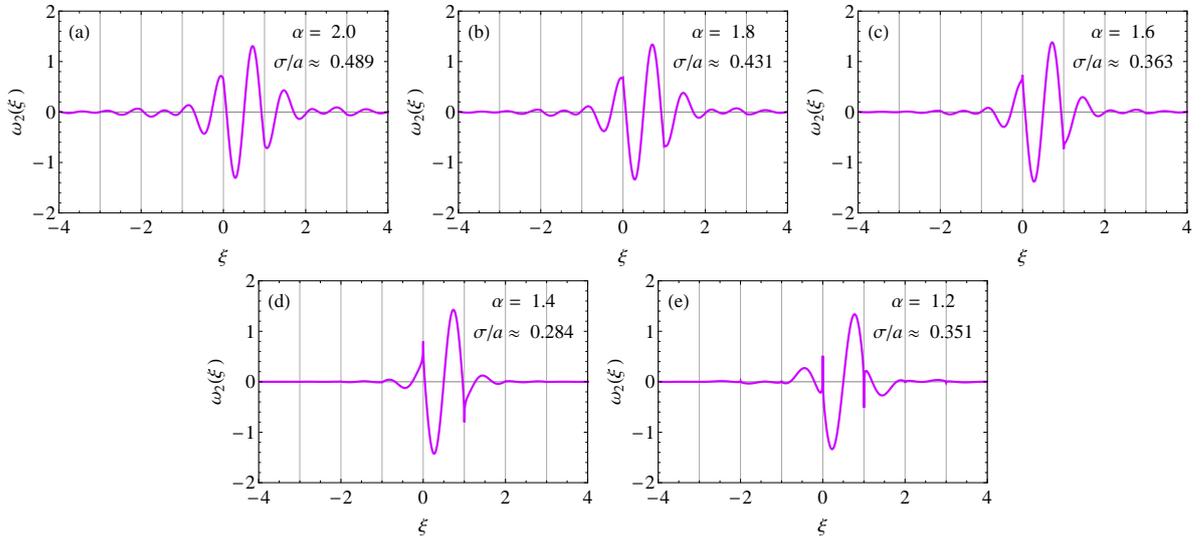


Figura 4.9: Como na Figura 4.7, mas para a banda rotulada $j = 2$.

As funções de Wannier das três bandas mais baixas são apresentadas nas Figuras 4.7, 4.8 e 4.9, para a derivada de Riesz de ordem $\alpha = 2, 1.8, 1.6, 1.4$ e 1.2 . Os resultados para o caso inteiro, $\alpha = 2$, são semelhantes aos reportados na Figura 6 da Ref. [16].

A função de Wannier de cada banda exibe uma simetria de reflexão bem definida. É simétrica em relação a $\xi = 0$ para a banda $j = 0$, porque a banda é classificada como $(q, s) = (0, 0)$, *i.e.*, $\Gamma_1 - X_1$. Para $j = 1$ [$j = 2$], ela é simétrica [antissimétrica] em relação a $\xi = 1/2$. Isto se deve ao fato de que a banda de índice $j = 1$ [$j = 2$] é do tipo $(q, s) = (1, 0)$ [$(q, s) = (1, 1)$], *i.e.*, $\Gamma_1 - X_2$ [$\Gamma_2 - X_1$].

As singularidades das funções de Bloch, quando κ está fixo e ξ varia, manifestam-se nas funções de Wannier. Elas aparecem em todos os $\xi = m$, quando m é um inteiro. Das

Eqs. (4.63) e (4.93), obtém-se

$$\omega(\xi) \approx \omega(m) \left[1 - \frac{(2\pi)^\alpha v \sec(\pi\alpha/2) |\xi - m|^{\alpha-1}}{2\Gamma(\alpha)} \right] - 4\pi(\xi - m) v \int_0^{1/2} \eta(\kappa) \operatorname{Im}[\chi_\kappa(m)] d\kappa. \quad (4.104)$$

No caso inteiro, $\alpha = 2$, as funções de Wannier herdam as quinas das funções de Bloch, ou seja,

$$\omega'(m^+) - \omega'(m^-) = (2\pi)^2 v \omega(m). \quad (4.105)$$

Para valores fracionários de α , observa-se que as cúspides nas funções de Wannier ficam mais notáveis quando α diminui.

Nas Figuras 4.7, 4.8 e 4.9, as funções de Wannier estão muito bem localizadas, com os seus centros e valores de desvio padrão calculados pelas Eqs. (4.65) e (4.64). As incertezas da posição são exibidas em cada painel. Para a banda $j = 0$, Figura 4.7, mostra que a distribuição de probabilidade é mais concentrada perto do poço quântico na origem para valores menores da ordem da derivada fracionária. Isso é semelhante ao comportamento da função de Bloch. Para as bandas mais altas, as mudanças na função de Wannier não são monotônicas. Elas se tornam mais localizadas à medida que a ordem da derivada fracionária diminui, atingindo um mínimo e depois perdem localização.

As Figuras 4.10, 4.11, 4.12 mostram gráficos logarítmicos da função de Wannier das bandas com $j = 0$, $j = 1$, $j = 2$, respectivamente. O decaimento linear no painel (a) da Figura 4.10 está de acordo com o decaimento exponencial dominante que ocorre no caso inteiro, $\alpha = 2.0$. Nos painéis restantes da Figura 4.10, para valores fracionários de α , uma queda mais lenta é aparente. Já nas Figuras 4.11 e 4.12, o decaimento é aparentemente mais lento, inclusive para $\alpha = 2.0$.

Para analisar o comportamento assintótico da função de Wannier $\omega(\xi)$, pode-se tomar $\xi = \bar{x}_j/a = q/2$ e $n > 0$. As Eqs. (4.97), (4.100) e (4.102) levam a casos particulares de

$$\Omega_{j,n} = |\omega_j(q/2 + n)| \approx \Lambda_j e^{-h_j n} n^{-\gamma_j}. \quad (4.106)$$

na qual Λ_j é uma constante positiva. Como resultado, $Q_n = \ln(\Omega_{j,n}/\Omega_{j,n+1})$ deve ser

aproximadamente uma função linear de $P_n = \ln(1 + 1/n)$, para $n \gg 1$, a saber

$$Q_n \approx h_j + \gamma_j P_n. \quad (4.107)$$

Quando $\alpha = 2$, tem-se $h_j > 0$ e $\gamma_j = 3/4$. O valor de γ_j pode ser ajustado para o valor fixo de h_j , que é dado pela Eq. (G.5). Para valores fracionários de α , não se espera um decaimento exponencial, *i.e.*, $h_j = 0$. Entretanto, γ_j deve ser igual $\alpha + 1$ ($\alpha + 2$), para cada função de Wannier par (ímpar). Como a análise das caudas das funções de Wannier requerem alta precisão, o passo em κ é reduzido para $1/8192$ para essa finalidade. Para $\alpha = 2.0$, o ajuste considera pares (P_n, Q_n) com $57 \leq n \leq 64$ e $121 \leq n \leq 128$, para $j = 0$ e $j \geq 1$, respectivamente. Nos casos fracionários, o ajuste leva $249 \leq n \leq 256$.

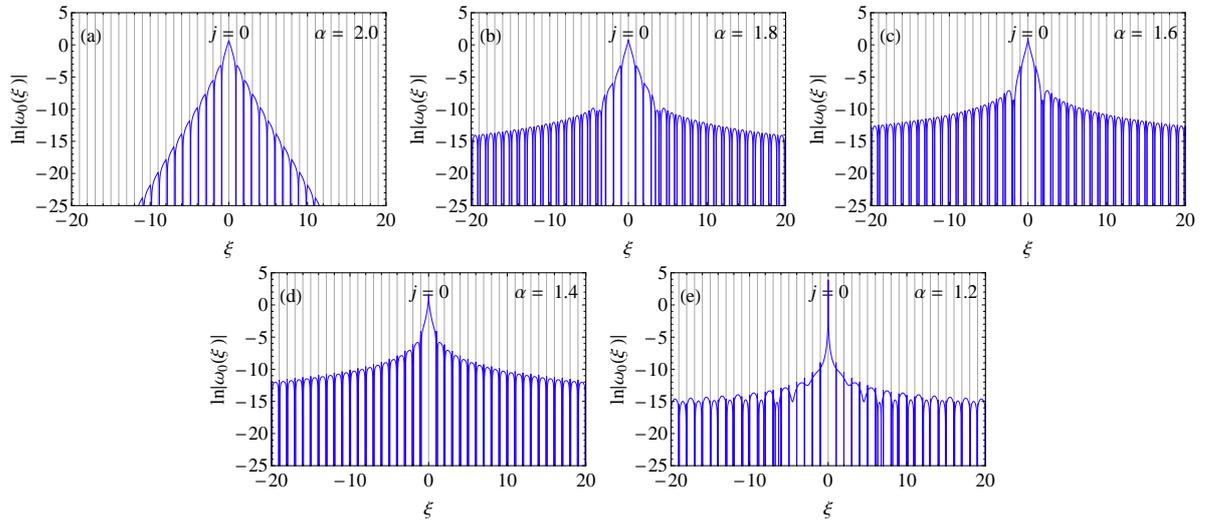


Figura 4.10: Logaritmo do valor absoluto das funções de Wannier da Figura 4.7.

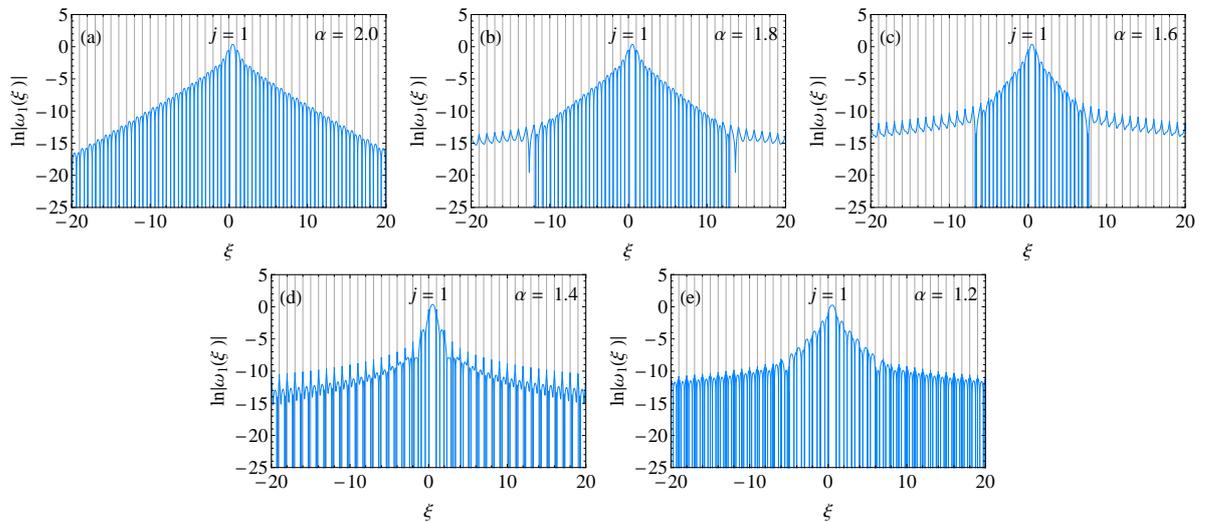


Figura 4.11: Logaritmo do valor absoluto das funções de Wannier da Figura 4.8.

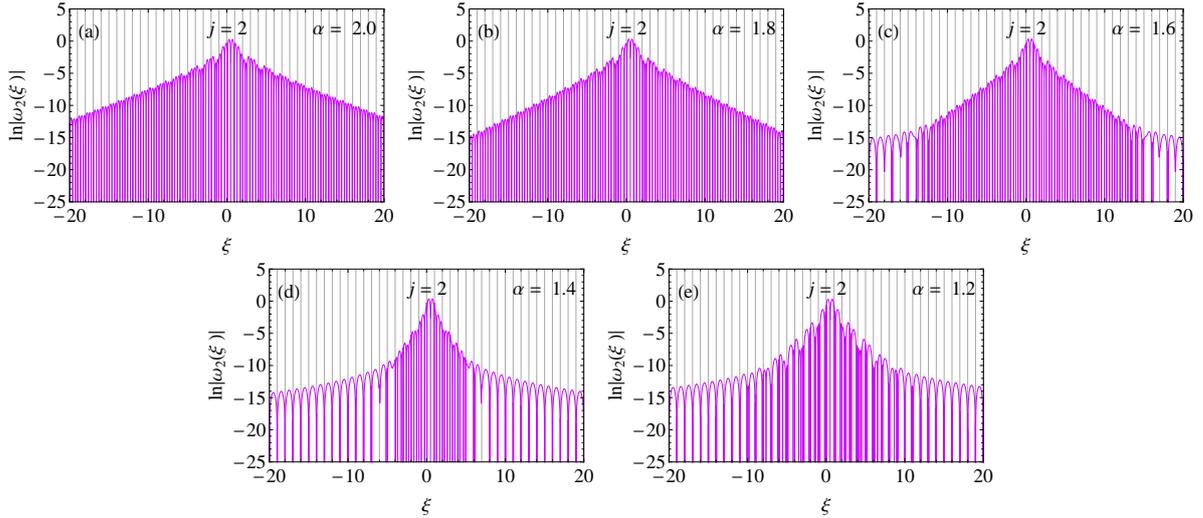


Figura 4.12: Logaritmo do valor absoluto das funções de Wannier da Figura 4.9.

Para a banda mais baixa, $j = 0$, os pares (P_n, Q_n) são exibidos na Figura 4.13. Convém ressaltar que a abscissa é $\ln(1 + 1/n)$. Portanto, os pontos mais à esquerda correspondem a valores maiores de n . Por sua vez, os pontos mais à direita são para valores menores de n e não correspondem ao comportamento assintótico da função de Wannier. Tais pontos são descartados na realização do ajuste linear. Quando n é grande o suficiente, os pontos são bem ajustados por uma linha reta, conforme indicado pelo lado direito da Eq. (4.107). O caso inteiro é mostrado no painel (a), com $h_0 \approx 1.906$ e $\gamma_0 \approx 3/4$. Para os casos fracionários nos painéis restantes, $h = 0$ e $\gamma_0 \approx \alpha + 1$. Este tipo de comportamento assintótico está presente no estado ligado de um único poço quântico, cuja função de onda adimensional é dada por (ver Apêndice D)

$$\chi_{qw}(\xi) = \sqrt{\frac{\alpha v \epsilon_{qw}}{2\pi(\alpha - 1)}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{2\pi i \kappa \xi} d\kappa}{|\kappa|^\alpha - \epsilon_{qw}}. \quad (4.108)$$

Para valores suficientemente grandes de $|\xi|$, ela decai como

$$\chi_{qw}(\xi) \approx \frac{\sec(\pi\alpha/2)}{2\epsilon_{qw}(2\pi)^\alpha \Gamma(-\alpha)} |\xi|^{\alpha+1} \sqrt{\frac{\alpha v}{2\pi(\alpha - 1)\epsilon_{qw}}}. \quad (4.109)$$

A validade dessa aproximação vem de forma similar aos argumentos do Apêndice I, e é aparente na Figura 4.14.

Os resultados para a banda $j = 1$ são mostrados na Figura 4.15. Eles são os mesmos que para $j = 0$, com exceção do decaimento exponencial no painel (a), que é dada por $h_1 \approx 0.653$. Para valores fracionários de α , a lei de potência para essas bandas é $n^{-(\alpha+1)}$,

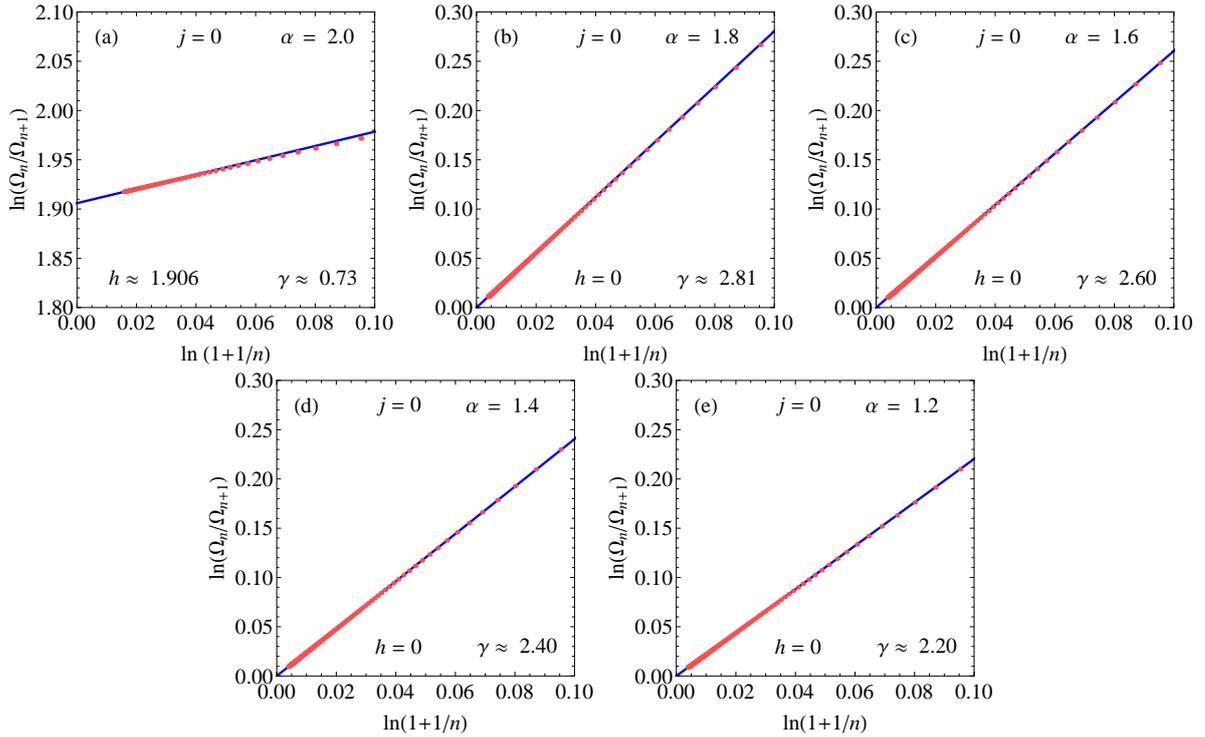


Figura 4.13: Ajuste linear que dá o parâmetro do comportamento assintótico da sequência Ω_n com $n \rightarrow \infty$. Isso corresponde aos valores selecionados das funções de Wannier exibidas na Figura 4.8.

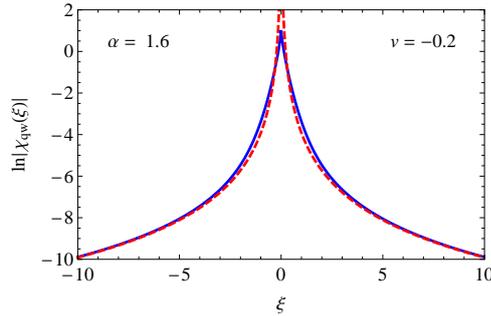


Figura 4.14: Comparação entre a forma exata (linha contínua) e assintótica (linha tracejada) da função de onda do estado ligado de um poço quântico isolado. A derivada de Riesz é de ordem $\alpha = 1.6$ e a intensidade potencial é $v = -0.2$.

porque a singularidade principal das funções de Bloch em Γ é κ^α . As bandas mais altas com valores ímpares de j se comportarão de forma semelhante.

A banda $j = 2$ tem uma propriedade diferente, conforme mostrado na Figura 4.16. Enquanto a função de Wannier do caso inteiro tem $h_2 \approx 0.426$ e $\gamma_2 \approx 3/4$, a potência da lei do decaimento no caso fracionário é dada por $\gamma_2 \approx (\alpha + 2)$. Isso ocorre porque a singularidade dominante da função de Bloch em Γ é $\kappa^{\alpha+1}$.

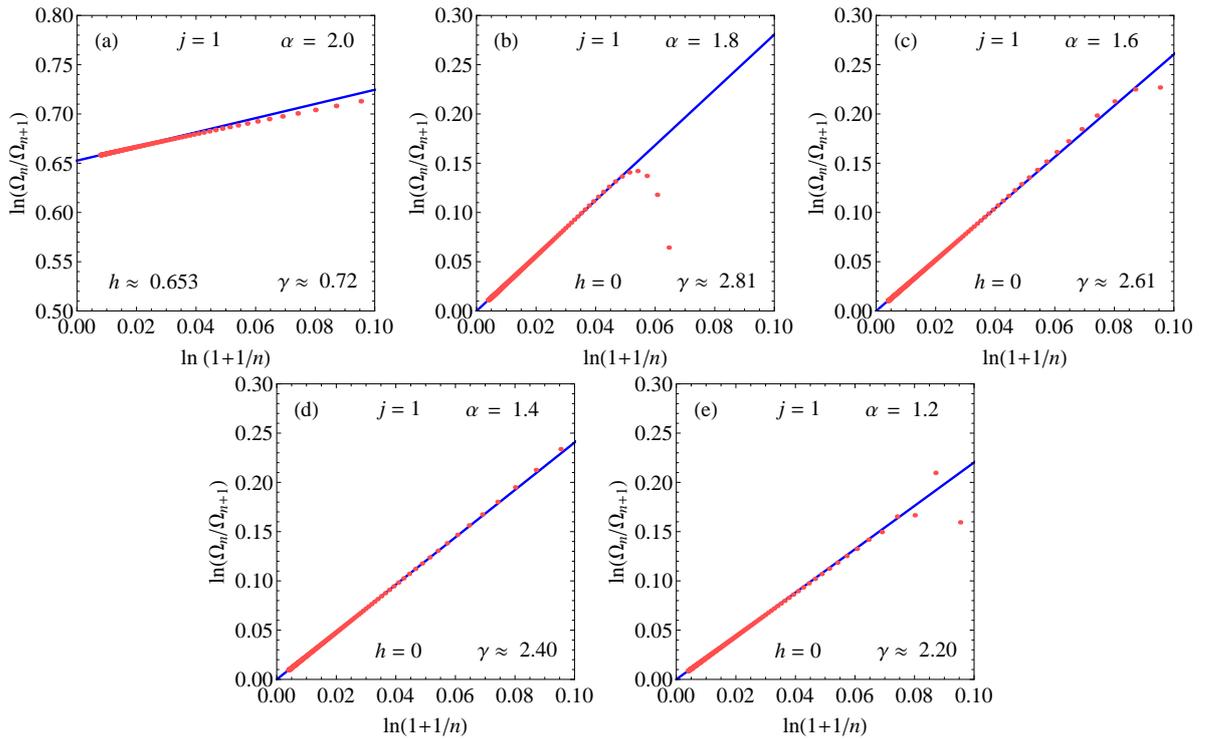


Figura 4.15: Como na Figura 4.13, mas para a banda $j = 1$.

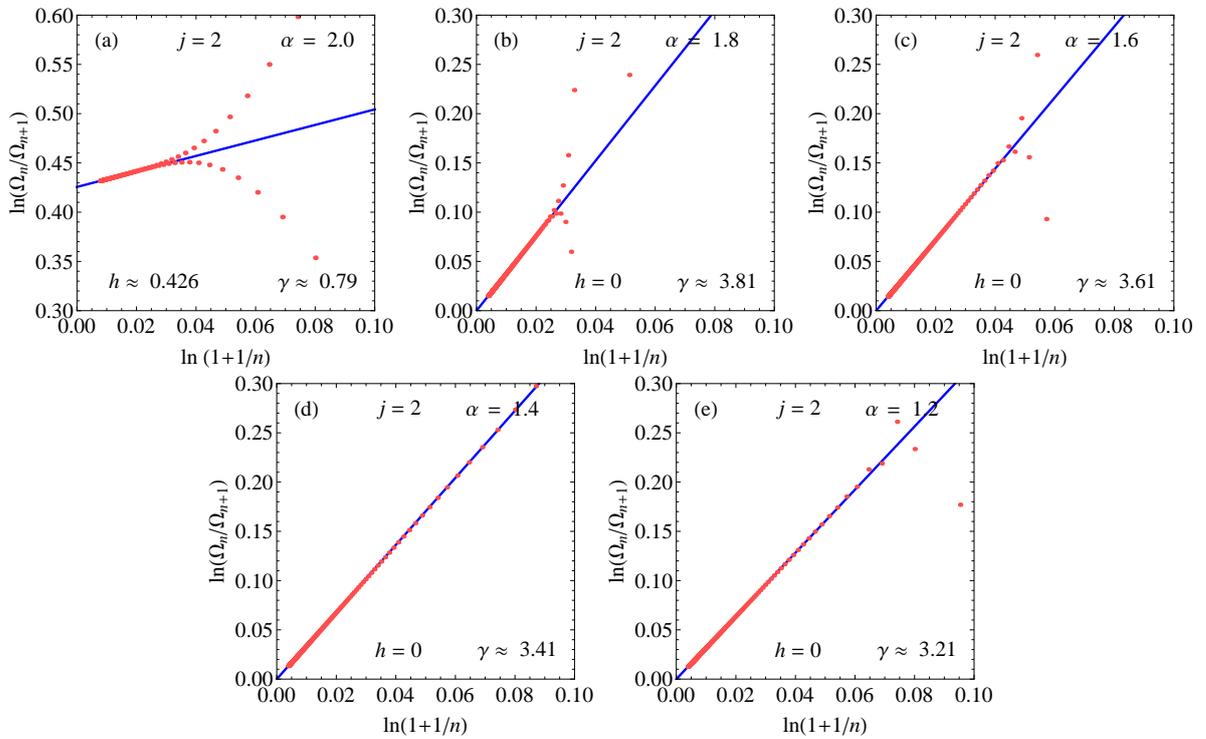


Figura 4.16: Como na Figura 4.13, mas para a banda $j = 2$.

4.3 Análise da influência da intensidade do potencial

Na seção anterior analisou-se a influência da ordem da derivada fracionária para um valor fixo do potencial, $v = -0.2$. Nesta seção apresenta-se uma análise detalhada sobre o comportamento das bandas de energia, das funções de Bloch e de Wannier, ao fixar o valor da ordem da derivada e variar a intensidade do potencial.

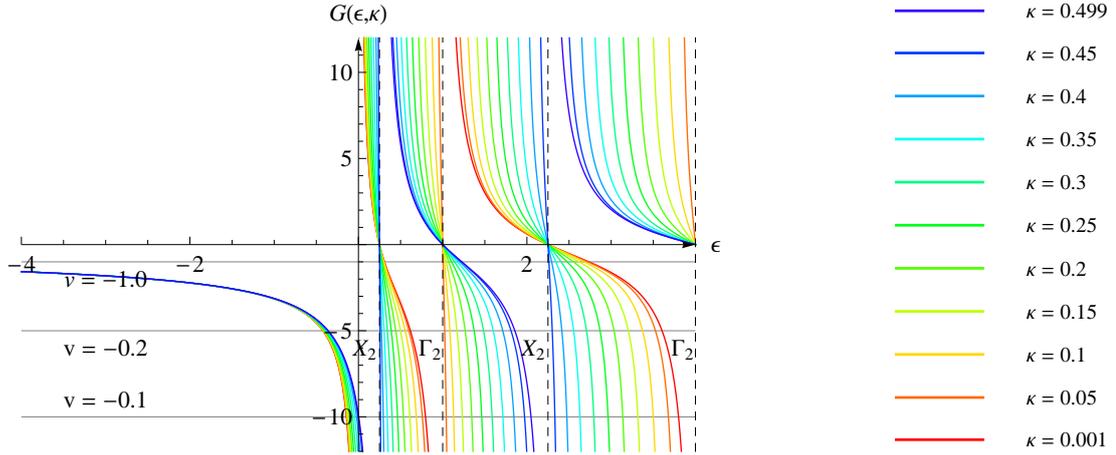


Figura 4.17: As curvas contínuas são para a função $G(\epsilon, \kappa)$, com κ tendo valores entre 0 e $1/2$, as linhas horizontais estão em $1/v$, com $v = -0.1$, $v = -0.2$ e $v = -1.0$ e a ordem da derivada é $\alpha = 2$.

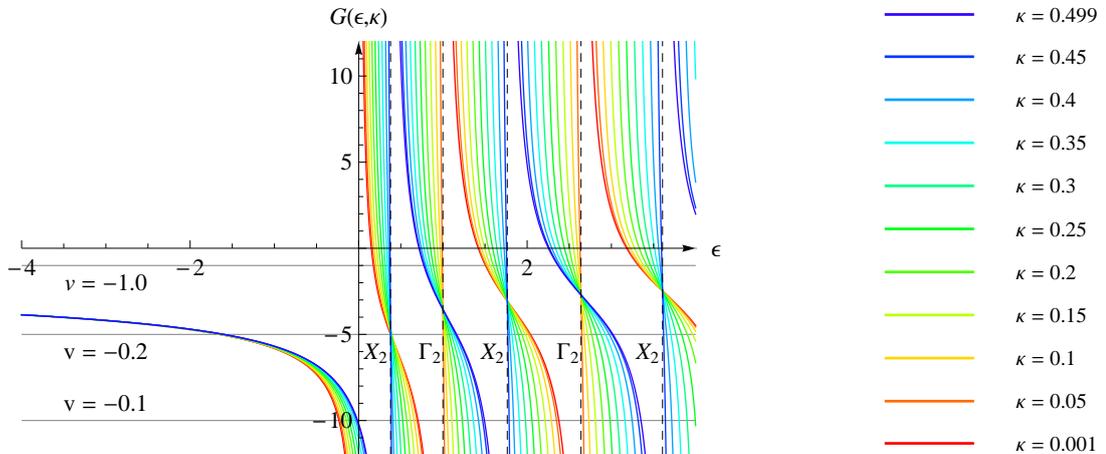


Figura 4.18: Como na Figura 4.17, entretanto a ordem da derivada fracionária é $\alpha = 1.4$.

As Figuras 4.17 e 4.18 mostram o gráfico da função $G(\epsilon, \kappa)$ para diferentes valores de κ . O vetor de onda κ varia no intervalo $[0, 1/2]$, com o passo $1/20$. Quando $\epsilon = (j/2)^\alpha$ e $\kappa = 0$ ou $\kappa = 1/2$, uma linha tracejada vertical é desenhada e rotulada Γ_2 ou X_2 . De acordo com a Eq. (4.30), obtém-se a faixa de energia de cada banda, desenhando uma linha horizontal na altura $1/v$. Isso é feito para $v = -0.1$, $v = -0.2$ e $v = -1.0$.

Na Figura 4.17 a ordem da derivada é $\alpha = 2$ e na Figura 4.18, é $\alpha = 1.4$. Como estamos interessados em valores negativos de v , basta considerar apenas os valores negativos da

função $G(\epsilon, \kappa)$. Para $\alpha = 2$ nota-se que a medida que o potencial se intensifica (quando $-v$ aumenta) as faixas das bandas de energia, da primeira em diante, se estreitam. Além disso, a largura de cada banda tende a zero quando $v \rightarrow -\infty$. Por este fato, entende-se que os poços quânticos que compõem a rede perdem o acoplamento à medida que a intensidade potencial aumenta. Já para $\alpha = 1.4$, é interessante notar que inicialmente as faixas das bandas se estreitam até um certo valor da intensidade do potencial, v_j , e depois alargam-se novamente. Nota-se que o valor da intensidade do potencial que minimiza a largura é diferente para cada banda. Esses valores são $v_1 \approx -0.200$, $v_2 \approx -0.282$, $v_3 \approx -0.327$ e $v_4 \approx -0.369$. Desta forma, as larguras da banda tendem a valores finitos quando $v \rightarrow -\infty$. De fato, o valor da intensidade do potencial é maior para as bandas superiores.

As bandas de energia para a ordem da derivada $\alpha = 2$ estão exibidas na Figura 4.19 e para a ordem da derivada $\alpha = 1.4$, na Figura 4.20. Para $\alpha = 2$ nota-se que a largura das bandas na janela de energia diminui à medida que o potencial se intensifica. Além disso, a monotonicidade das bandas se mantém para todas as intensidades dos potenciais analisados. Já para o caso fracionário, $\alpha = 1.4$, percebe-se que, até uma certa intensidade do potencial, as bandas permanecem com as características do caso inteiro, ou seja, a medida que o potencial se intensifica a largura das bandas diminui. Depois deste certo potencial, a largura das bandas aumenta novamente, mas com a sua monotonicidade invertida. Isto pode ser visto na Figura 4.18 e na Figura 4.20 (c). Uma característica comum para as duas ordens da derivada, $\alpha = 2$ e $\alpha = 1.4$, é que, à medida que a intensidade do potencial aumenta, a primeira banda deixa de aparecer na janela de energia considerada. De fato, com o aumento progressivo da intensidade do potencial, a energia máxima dessa banda tende a $-\infty$.

As funções de Bloch para a ordem da derivada $\alpha = 2$ estão exibidas na Figura 4.21 e para $\alpha = 1.4$, na Figura 4.22. Nas ilustrações tem-se a função de Bloch da segunda banda, $j = 1$, em $\kappa = 0$, para diferentes valores do potencial. Como mencionado na Seção 4.2, as funções são periódicas e os gráficos são restritos a $-1/2 \leq \xi \leq 1/2$. Para $\alpha = 2$, a medida que o potencial se intensifica, os zeros da função de onda se aproximam da origem e o valor da função se aproxima de zero. Além disso, neste processo, a densidade de probabilidade diminui perto do poço quântico. Aparentemente, para $\alpha = 1.4$ os processos descritos ocorrem mais rápido em comparação com o caso inteiro.

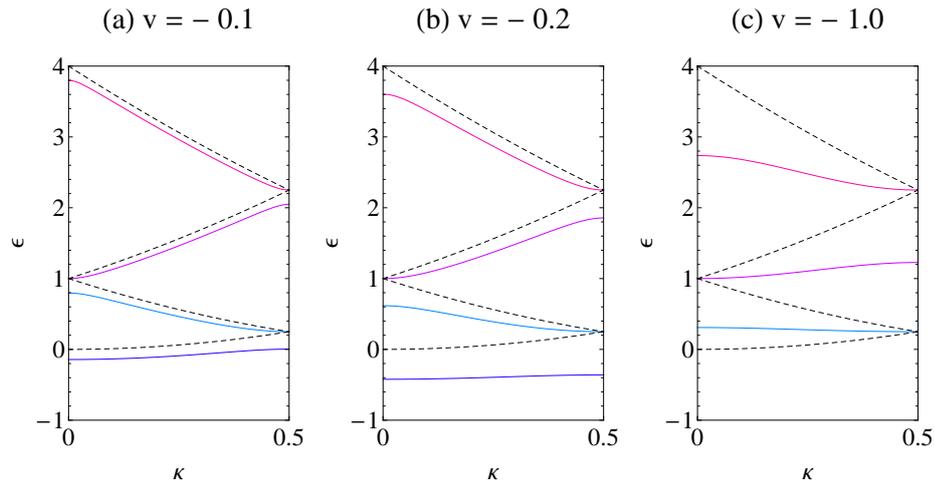


Figura 4.19: A banda de energia para diferentes valores da intensidade do potencial do modelo Kronig-Penney e derivada de Riesz da ordem $\alpha = 2$.

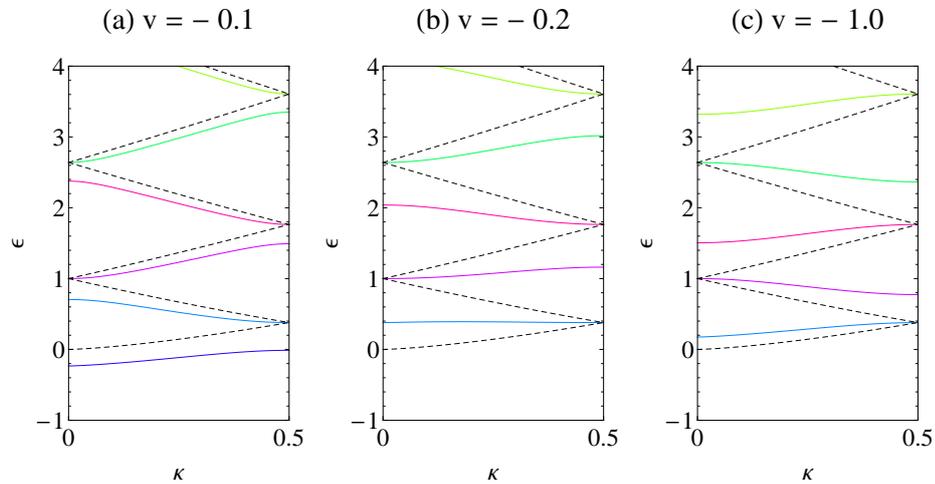


Figura 4.20: Como na Figura 4.19, entretanto a ordem da derivada de Riesz é $\alpha = 1.4$.

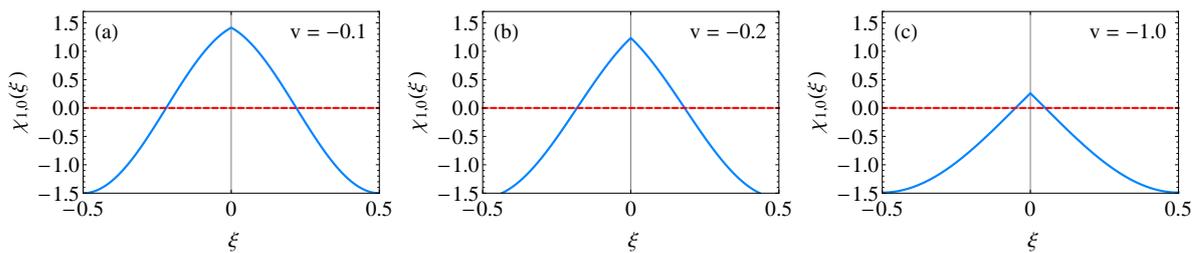


Figura 4.21: Função de Bloch, na primeira banda da Figura 4.19 em $k = 0$, com variação dos potenciais e com a ordem da derivada de Riesz em $\alpha = 2$. As partes real e imaginária são dadas pela linha sólida e a tracejada.

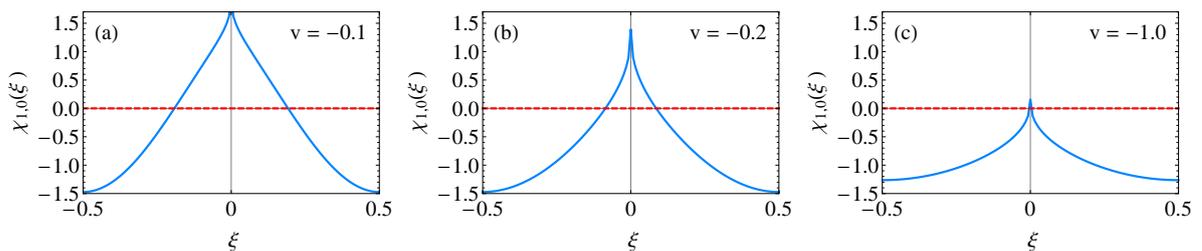


Figura 4.22: Como na Figura 4.21, entretanto a ordem da derivada é $\alpha = 1.4$.

Nas Figuras 4.23 e 4.24 estão representadas as funções de Wannier da segunda banda para diferentes valores do potencial. Na Figura 4.23 a ordem da derivada é $\alpha = 2$ e na Figura 4.24, é $\alpha = 1.4$. Para $\alpha = 2$ as funções de Wannier tornam-se ligeiramente mais localizadas à medida que a intensidade do potencial aumenta. No caso da ordem da derivada fracionária, $\alpha = 1.4$, pode-se perceber um comportamento similar ao analisado no caso da largura das bandas de energia, descrito anteriormente. Ou seja, inicialmente há um aumento na localização e posteriormente uma diminuição.

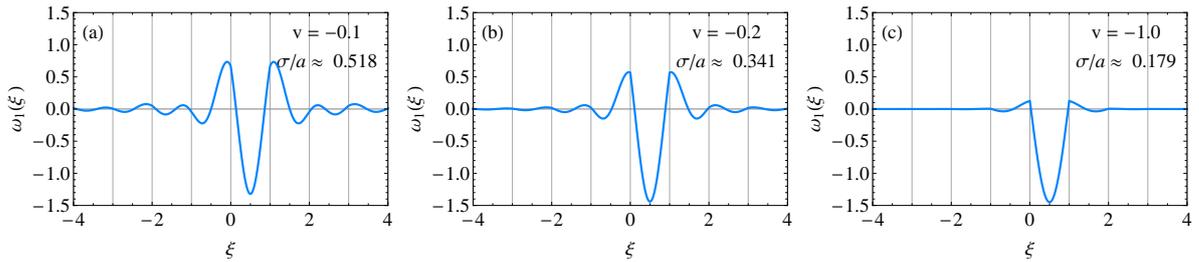


Figura 4.23: A função de Wannier da segunda banda para diferentes valores da intensidade do potencial de Kronig-Penney, com a derivada de Riesz de ordem $\alpha = 2$. As linhas verticais pontilhadas representam os poços quânticos.

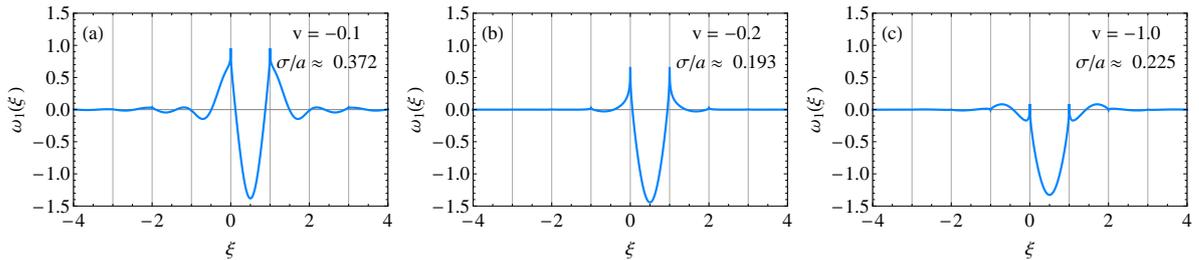


Figura 4.24: Como na Figura 4.23, entretanto a ordem da derivada de Riesz é $\alpha = 1.4$.

Para finalizar, verificamos o grau de localização das funções de Wannier, apresentadas nesta seção, por meio do cálculo de sua variância e desvio padrão da segunda banda. Nas Figuras 4.23 e 4.24 apresentamos os resultados numéricos. Nestes pode-se verificar que, para $\alpha = 2.0$, à medida que o potencial se intensifica o valor do desvio padrão aumenta. Para $\alpha = 1.4$, pode-se verificar o comportamento descrito para a Figura 4.24, ou seja, inicialmente o desvio padrão aumenta e depois diminui.

4.4 Conclusões sobre o modelo de Kronig-Penney fracionário

As bandas de energia e as funções de Wannier de um hamiltoniano unidimensional com derivada espacial de ordem fracionária foram calculadas. Tal derivada foi tomada com o

operador de Riesz. A não-localidade da derivada fracionada foi levada em consideração. Considerando a periodicidade do potencial, as funções de Bloch foram obtidas através de um problema de autovalores. Os resultados numéricos foram apresentados para o modelo de Kronig-Penney. Nesse caso, os autovalores satisfazem a uma equação transcendental. Esta envolve uma série que converge lentamente para valores fracionários de α , e sua convergência foi acelerada usando a função zeta de Lerch. Foi encontrado um bom acordo entre a banda mais baixa e o estado ligado de um único poço quântico [25], incluindo o comportamento assintótico.

Demonstrou-se que o número de bandas no intervalo de energia investigado aumenta à medida que a ordem do operador fracionário de Riesz diminui. Enquanto a banda mais baixa encolhe à medida que a intensidade do potencial cresce, as bandas mais altas do caso fracionário apresentam comportamento anômalo. Elas primeiro se estreitaram, ficando quase planas em um valor especial da intensidade do potencial, então, se alargam, atingindo um valor finito à medida que o potencial continua a se intensificar. A largura das funções de Wannier se comporta de forma semelhante. As funções de Bloch e de Wannier exibem as cúspides nas posições dos poços quânticos. Essas cúspides ficam mais acentuadas quando a ordem da derivada diminui. Vale a pena notar que as cúspides não ocorrem nas funções de onda da Ref. [41]. Isto reforça a ideia de que os tratamentos locais de equações baseadas na derivada de Riesz apresentam importantes limitações.

As funções de Wannier do caso fracionário não decaem exponencialmente e apresentam um decaimento em forma de lei de potência. De fato, o valor absoluto de cada função de Wannier simétrica (antissimétrica) na n -ésima célula decai como $|n|^{-\gamma}$, com $\gamma = \alpha + 1$ ($\gamma = \alpha + 2$). Tal comportamento foi atribuído a não suavidade das bandas e das funções de Bloch no ponto Γ . Além disso, foram obtidas fórmulas simples para as caudas das funções de Wannier calculadas.

Como última análise deste capítulo, fez-se um estudo sobre a influência da intensidade do potencial nas bandas de energia, nas funções de Bloch e de Wannier. Para a análise, fixou-se o valor da ordem da derivada e variou-se a intensidade do potencial. Verificou-se que para diferentes valores da intensidade do potencial as funções apresentavam características diferenciadas. Para $\alpha = 1.4$, as bandas de energia apresentaram troca da monotonicidade das bandas a partir de um certo valor da intensidade do potencial. O grau de localização das funções de Wannier para bandas com $j \geq 1$ também foi afetado

por mudanças da intensidade do potencial. Testes numéricos indicam que a incerteza da posição se comporta de forma semelhante à largura da banda, ou seja, diminui e, em seguida, aumenta, quando $|v|$ cresce.

Capítulo 5

Modelo de Kronig-Penney fracionário com defeito

Este capítulo apresenta uma análise dos estados eletrônicos num potencial não periódico. Estuda-se os níveis de energia e as funções de onda para modelo de Kronig-Penney fracionário com defeito. O defeito consiste em alterar a intensidade do potencial de um dos deltas de Dirac que formam o potencial. Este delta se localizará na origem do sistema, preservando a simetria de inversão. Os estados da partícula podem ser localizados ou não. Neste trabalho nos limitaremos ao estudo dos estados localizados.

Para o cálculo dos estados localizados pode-se utilizar o método da transformada de Fourier e o método das funções de Wannier. Iniciaremos o estudo pelo método da transformada de Fourier, apresentando desenvolvimentos teóricos e resultados numéricos. Esse tratamento terá alguns pontos em comuns com a Ref. [26]. Em seguida, apresentamos os resultados obtidos mediante as funções de Wannier. Por fim, apresentaremos uma comparação entre os dois métodos. Os cálculos numéricos e a elaboração das figuras foram realizados com o auxílio do software *Mathematica* [73].

5.1 Cálculo dos estados localizados mediante transformada de Fourier

A equação a ser resolvida é a equação de Schrödinger fracionária independente do tempo, Eq. (2.33), dada por

$$-C_\alpha D^\alpha \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Para o modelo de Kronig-Penney fracionário com defeito na origem, utilizaremos o potencial da forma

$$V(x) = V_0 \delta\left(\frac{x}{a}\right) + \sum_{m \in \mathbb{Z}^*} V \delta\left(\frac{x}{a} - m\right), \quad (5.1)$$

em que V é a intensidade do potencial de todos os poços quânticos, excetuando o poço quântico situado na origem que tem intensidade V_0 . Substituindo o potencial na Eq. (2.33), e aplicando a transformada de Fourier em ambos os lados da equação, com auxílio da Eq. (2.25), obtemos

$$C_\alpha |k|^\alpha \phi(k) + aV_0 \psi(0) + aV \sum_{m \in \mathbb{Z}^*} e^{-ikma} \psi(ma) = E\phi(k), \quad (5.2)$$

que equivale a

$$(E - C_\alpha |k|^\alpha) \phi(k) = a \Delta V \psi(0) + aV \sum_{m \in \mathbb{Z}} e^{-ikma} \psi(ma). \quad (5.3)$$

Aqui ΔV é a variação de intensidade do potencial, ou seja, $\Delta V = V_0 - V$. Os valores da função de onda nas posições dos poços quânticos podem ser calculados pela transformada inversa de Fourier, Eq. (A.4), ou seja,

$$\psi(ma) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikma} \phi(k) dk. \quad (5.4)$$

Substituindo esta expressão no segundo termo do lado direito da Eq. (5.3), tem-se

$$\begin{aligned}
(E - C_\alpha |k|^\alpha) \phi(k) &= a \Delta V \psi(0) + \frac{aV}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k') \sum_{m \in \mathbb{Z}} e^{i(k'-k)ma} dk' \\
&= a \Delta V \psi(0) + V \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k') \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta \left(k' - \left(k + \frac{2\pi n}{a} \right) \right) dk' \\
&= a \Delta V \psi(0) + VS(k),
\end{aligned} \tag{5.5}$$

em que

$$S(k) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \phi \left(k + \frac{2\pi n}{a} \right). \tag{5.6}$$

Para isolar $\phi(k)$, divide-se a equação (5.5) por $E - C_\alpha |k|^\alpha$ o que nos leva a

$$\phi(k) = \frac{a \Delta V \psi(0)}{E - C_\alpha |k|^\alpha} + \frac{VS(k)}{E - C_\alpha |k|^\alpha} + P(k), \tag{5.7}$$

na qual $P(k)$ assumirá valores distintos, dependendo do valor da energia, a saber,

$$P(k) = \begin{cases} A_+ \delta \left(k - \left(\frac{E}{C_\alpha} \right)^{1/\alpha} \right) + A_- \delta \left(k + \left(\frac{E}{C_\alpha} \right)^{1/\alpha} \right), & \text{se } E > 0 \\ 0, & \text{se } E < 0, \end{cases} \tag{5.8}$$

em que A_+ e A_- são constantes. De fato, ao multiplicar a Eq. (5.7) por $E - C_\alpha |k|^\alpha$ recupera-se a Eq.(5.5). Isso decorre das propriedades da delta de Dirac. Este procedimento foi utilizado por Capelas de Oliveira *et al.* [25] para tratar o caso $V = 0$ (isto é, um poço delta isolado).

Para compreender a importância do termo $P(k)$ deve-se levar em conta que a função de onda é dada pela transformada inversa de Fourier, Eq. (A.4), ou seja,

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \phi(k) dk. \tag{5.9}$$

Logo, a contribuição de $P(k)$ para $\psi(x)$ é

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} P(k) e^{ikx} dk = \begin{cases} \frac{A_+}{2\pi} e^{ix(E/C_\alpha)^{1/\alpha}} + \frac{A_-}{2\pi} e^{-ix(E/C_\alpha)^{1/\alpha}}, & \text{se } E > 0 \\ 0, & \text{se } E < 0. \end{cases} \tag{5.10}$$

Para $E > 0$, trata-se de uma combinação linear de ondas harmônicas que se estendem ao infinito. Como estamos à procura de estados localizados, escolhemos $A_- = A_+ = 0$, ou

seja, $P(k) = 0$. Portanto, no que segue, consideramos

$$\phi(k) = \frac{a \Delta V \psi(0)}{E - C_\alpha |k|^\alpha} + \frac{V S(k)}{E - C_\alpha |k|^\alpha}. \quad (5.11)$$

Precisamos calcular $\phi(k)$, que depende de $S(k)$. Usando a Eq. (5.11) para substituir $\phi(k + 2\pi n/a)$ na Eq. (5.6), temos

$$S(k) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \phi\left(k + \frac{2\pi n}{a}\right) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left[\frac{a \Delta V \psi(0)}{E - C_\alpha \left|k + \frac{2\pi n}{a}\right|^\alpha} + \frac{V S\left(k + \frac{2\pi n}{a}\right)}{E - C_\alpha \left|k + \frac{2\pi n}{a}\right|^\alpha} \right]. \quad (5.12)$$

Introduzindo a função

$$g(E, k) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{E - C_\alpha \left|k + \frac{2\pi n}{a}\right|^\alpha}, \quad (5.13)$$

e levando em conta que $S(k)$ é periódica com período $2\pi/a$, obtemos

$$S(k) = a \Delta V \psi(0) g(E, k) + V S(k) g(E, k), \quad (5.14)$$

ou seja,

$$S(k)[1 - Vg(E, k)] = a \Delta V \psi(0)g(E, k). \quad (5.15)$$

Para isolar $S(k)$ da Eq. (5.15), assim como na passagem da Eq. (5.5) para a Eq. (5.7), deve-se dividir ambos os lados por $1 - Vg(E, k)$. Nesse sentido, é preciso considerar o conjunto K de valores k que anulam $1 - Vg(E, k)$. O resultado é

$$S(k) = \frac{a \Delta V \psi(0)g(E, k)}{1 - Vg(E, k)} + \sum_{k' \in K} B_{k'} \delta(k - k'). \quad (5.16)$$

Com isso, substituindo a Eq. (5.16) na Eq. (5.11), tem-se

$$\phi(k) = \frac{a \Delta V \psi(0)}{E - C_\alpha |k|^\alpha} + \frac{a \Delta V \psi(0)g(E, k)}{(E - C_\alpha |k|^\alpha)(1 - Vg(E, k))} + \frac{V \sum_{k' \in K} B_{k'} \delta(k - k')}{E - C_\alpha |k|^\alpha}, \quad (5.17)$$

que é equivalente a

$$\phi(k) = \frac{a \Delta V \psi(0)}{E - C_\alpha |k|^\alpha} \left[\frac{1}{1 - Vg(E, k)} \right] + \Lambda(k), \quad (5.18)$$

na qual,

$$\Lambda(k) = \frac{V}{E - C_\alpha |k|^\alpha} \sum_{k' \in K} B_{k'} \delta(k - k'). \quad (5.19)$$

Para obter a função de onda, utilizamos a Eq. (5.9). O resultado é

$$\psi(x) = \frac{a \Delta V \psi(0)}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ikx} dk}{(E - C_\alpha |k|^\alpha)(1 - Vg(E, k))} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \Lambda(k) e^{ikx} dk. \quad (5.20)$$

O segundo termo desta equação é uma sobreposição de ondas harmônicas que se estendem ao infinito. Portanto, ele tem relevância apenas para estados estendidos cuja energia pertence a uma das bandas do cristal perfeito. Como estamos à procura dos estados localizados, escolhemos $B_{k'} = 0$, ou seja, $\Lambda(k) = 0$. Com isso, a forma da função de onda dos estados localizados é dada pela equação

$$\psi(x) = \frac{a \Delta V \psi(0)}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ikx} dk}{(E - C_\alpha |k|^\alpha)(1 - Vg(E, k))}. \quad (5.21)$$

A forma adimensional da função de onda é dada por

$$\chi(\xi) = \psi(x) \sqrt{a} = \Delta v \chi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{2\pi i \kappa \xi} d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)(1 - vG(\epsilon, \kappa))}, \quad (5.22)$$

em que $\xi = x/a$, $v = V/K_\alpha$, $\Delta v = \Delta V/K_\alpha$, $\chi(0) = \psi(0)\sqrt{a}$, $\epsilon = E/K_\alpha$ e $\kappa = k/(2\pi/a)$. Como no Capítulo 4, $K_\alpha = C_\alpha \left(\frac{2\pi}{a}\right)^\alpha$ e

$$G(\epsilon, \kappa) = K_\alpha g(E, k) = K_\alpha \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{E - C_\alpha \left|k + \frac{2\pi n}{a}\right|^\alpha} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{\epsilon - |\kappa + n|^\alpha}. \quad (5.23)$$

Esta expressão coincide com a definição de $G(\epsilon, \kappa)$ dada pela Eq. (4.31).

Ainda é necessário especificar o valor de $\chi(0)$. Seu valor absoluto será calculado a partir da condição de normalização, que é dada por

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\chi(\xi)|^2 d\xi = 1. \quad (5.24)$$

A integral de $|\chi(\xi)|^2$ pode ser simplificada da forma

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} |\chi(\xi)|^2 d\xi &= \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(\xi)^* \chi(\xi) d\xi \\
&= \Delta v^2 |\chi(0)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{2\pi i(\kappa-\kappa')\xi} d\xi \right) d\kappa d\kappa'}{[\epsilon - |\kappa|^\alpha] [\epsilon - |\kappa'|^\alpha] [1 - vG(\epsilon, \kappa)] [1 - vG(\epsilon, \kappa')]} \\
&= \Delta v^2 |\chi(0)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\delta(\kappa' - \kappa) d\kappa d\kappa'}{[\epsilon - |\kappa|^\alpha] [\epsilon - |\kappa'|^\alpha] [1 - vG(\epsilon, \kappa)] [1 - vG(\epsilon, \kappa')]} \\
&= |\Delta v \chi(0)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)^2 (1 - vG(\epsilon, \kappa))^2}. \tag{5.25}
\end{aligned}$$

Portanto, $\chi(0)$ satisfaz

$$|\Delta v \chi(0)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)^2 (1 - vG(\epsilon, \kappa))^2} = 1. \tag{5.26}$$

Sem perda de generalidade, escolhemos $\Delta v \chi(0) > 0$ e obtemos

$$\chi(0) = \frac{1}{\Delta v \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)^2 (1 - vG(\epsilon, \kappa))^2}}}. \tag{5.27}$$

Substituindo a Eq. (5.27) na Eq. (5.22), obtêm-se a função de onda dos estados localizados, isto é,

$$\chi(\xi) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{2\pi i\kappa\xi} d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)(1 - vG(\epsilon, \kappa))}}{\sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)^2 (1 - vG(\epsilon, \kappa))^2}}}. \tag{5.28}$$

Neste momento, temos como calcular a função de onda, mas, para isso, é preciso determinar quais valores de ϵ correspondem a estados localizados. Como a Eq. (5.22) tem que valer para $\xi = 0$, temos que

$$\chi(0) = \Delta v \chi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)(1 - vG(\epsilon, \kappa))}. \tag{5.29}$$

Consequentemente, a energia de todo estado localizado deve satisfazer

$$\frac{1}{\Delta v} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)(1 - vG(\epsilon, \kappa))}. \quad (5.30)$$

As Eqs. (5.28) e (5.30) são suficientes para realizar os cálculos numéricos. No entanto, é conveniente expressar as integrais impróprias em termos de integrais de 0 a 1/2 na variável κ , isto é,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)(1 - vG(\epsilon, \kappa))} &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{n-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)(1 - vG(\epsilon, \kappa))} \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa + n|^\alpha)(1 - vG(\epsilon, \kappa + n))} \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa + n|^\alpha)(1 - vG(\epsilon, \kappa))} \\ &= \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(1 - vG(\epsilon, \kappa))} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{(\epsilon - |\kappa + n|^\alpha)} d\kappa \\ &= \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \frac{G(\epsilon, \kappa)}{(1 - vG(\epsilon, \kappa))} d\kappa \\ &= 2 \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{G(\epsilon, \kappa)}{(1 - vG(\epsilon, \kappa))} d\kappa. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Nesta simplificação levamos em conta $G(\epsilon, \kappa + n) = G(\epsilon, \kappa) = G(\epsilon, -\kappa)$. Dessa maneira a Eq. (5.30) se reduz a

$$\int_0^{\frac{1}{2}} \frac{d\kappa}{\frac{1}{G(\epsilon, \kappa)} - v} = \frac{1}{2 \Delta v}. \quad (5.32)$$

Esta equação é resolvida numericamente mediante o software *Mathematica* [73].

De forma análoga, a Eq.(5.28) para a função de onda se reduz à forma

$$\chi(\xi) = \frac{\sqrt{2} \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{\text{Re}[G(\epsilon, \kappa, \xi)] d\kappa}{1 - vG(\epsilon, \kappa)}}{\sqrt{- \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(1 - vG(\epsilon, \kappa))^2} \frac{\partial G}{\partial \epsilon}(\epsilon, \kappa) d\kappa}}. \quad (5.33)$$

5.1.1 Resultados numéricos para os níveis de energia

Para calcular os níveis de energia mediante a transformada de Fourier, resolvemos numericamente a Eq. (5.32). Em todos os casos, consideramos que a intensidade dos

poços quânticos é dada por $v = -0.2$, exceto no poço quântico da origem, v_0 , que assumirá outras intensidades. Além disso os cálculos são realizados para diferentes valores da ordem da derivada de Riesz, α .

Na Figura 5.1 apresentamos os níveis de energia dos estados localizados para $\alpha = 2$. No painel (a), em que $v_0/v > 1$, nota-se a existência de apenas um nível de estado localizado. Este se encontra abaixo da banda inferior, $j = 0$. No painel (b), em que $v_0/v < 1$, não existe nível eletrônico abaixo da banda inferior. Entretanto, há um estado localizado em cada um dos gaps. Isso está em acordo com a Figura 9 do artigo de Saxon e Hutner [52]. Como naquela figura, no painel (b) temos $v_0/v \lesssim 1$, e cada nível de estado localizado está ligeiramente acima da banda de energia correspondente.

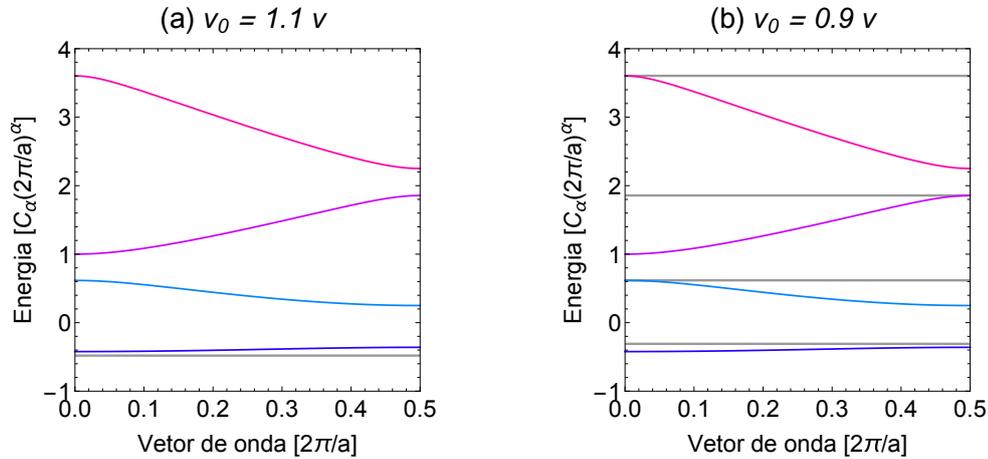


Figura 5.1: Gráfico dos níveis de energia dos estados localizados para $\alpha = 2.0$. A intensidade do potencial na origem é (a) $v_0 = 1.1v$ e (b) $v_0 = 0.9v$.

Na Figura 5.2 apresentamos os níveis de energia dos estados localizados para o modelo de ordem fracionária, com $\alpha = 1.6$. No painel (a), em que $v_0/v > 1$, nota-se que distância entre o nível mais baixo do estado localizado e o fundo da banda inferior, aumenta ao passar da ordem $\alpha = 2.0$ para $\alpha = 1.6$. No painel (b), nota-se que distância entre o nível mais baixo e o topo da banda inferior aumenta ao passar de $\alpha = 2.0$ para $\alpha = 1.6$.

5.1.2 Resultados numéricos para as funções de onda

Nesta subseção apresentamos as funções de onda do primeiro nível de energia dos estados localizados, que foram apresentados nas Figuras 5.1 e 5.2. Os cálculos foram realizados para $\alpha = 2.0$ e 1.6 , para diferentes valores da intensidade do potencial.

Na Figura 5.3 nota-se que as funções de onda são simétricas com relação ao poço quântico da origem e estão bem localizadas dentro da janela selecionada. Além disso, as

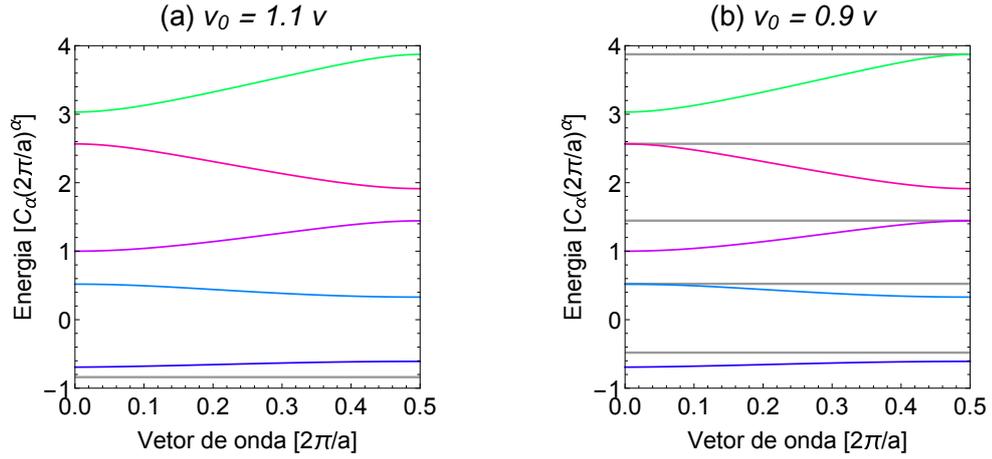


Figura 5.2: Gráfico dos níveis de energia dos estados localizados para $\alpha = 1.6$. A intensidade do potencial na origem é (a) $v_0 = 1.1 v$ e (b) $v_0 = 0.9 v$.

funções apresentam singularidades nos poços quânticos. No painel (a) verifica-se que a função não se anula e possui o mesmo sinal nos diferentes poços quânticos. No painel (b) verifica-se que a função se anula entre os poços quânticos e apresenta alternância de sinal de poço para poço.

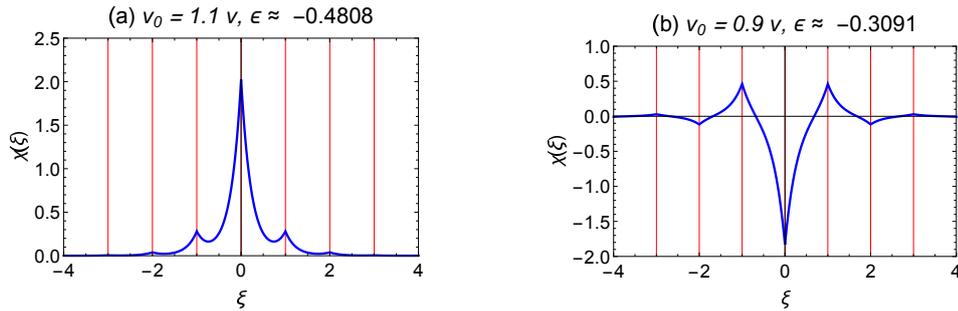


Figura 5.3: Gráfico da função de onda relativa ao primeiro nível de energia de estado localizado para $\alpha = 2.0$. No item (a) $v_0 = 1.1 v$ e no item (b) $v_0 = 0.9 v$.

Na Figura 5.4 os painéis apresentam as mesmas características do caso inteiro. Entretanto, nota-se que as singularidades estão mais acentuadas.

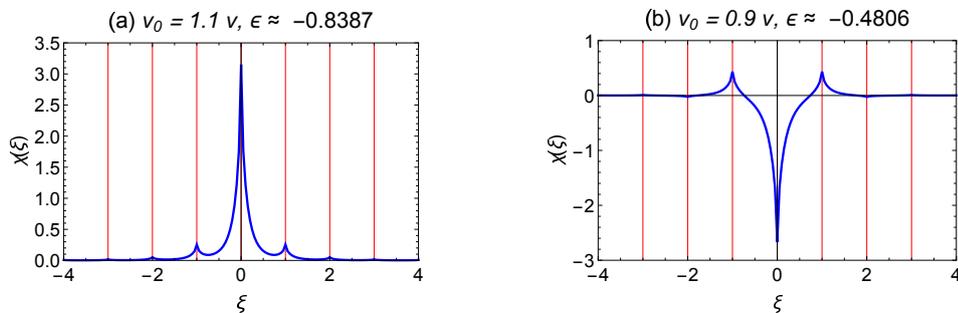


Figura 5.4: Como na Figura 5.3 mas para $\alpha = 1.6$.

É importante notar que as funções de onda, mostradas nas Figuras 5.3 e 5.4, apresentam diferentes comportamentos assintóticos. De fato, a primeira decai exponencialmente,

enquanto a segunda decai em forma de lei de potência. Para ilustrar esse fato convém considerar a sequência de valores

$$\Omega_n = |\chi(n)|, \quad (5.34)$$

com n inteiro positivo. Como no Capítulo 4, se o decaimento de Ω_n , quando n tende ao infinito, for um produto entre a lei exponencial e a lei de potência, teríamos que

$$\Omega_n \approx \Lambda e^{-hn} n^{-\gamma}, \quad (5.35)$$

quando n suficientemente grande. Consequentemente,

$$\ln(\Omega_n/\Omega_{n+1}) \approx h \ln(1 + 1/n) + \gamma, \quad (5.36)$$

Para extrair os valores de h e γ pode-se ajustar por uma reta o gráfico de $\ln(\Omega_n/\Omega_{n+1})$ contra $\ln(1 + 1/n)$.

Os resultados para $\alpha = 2.0$ e 1.6 , para este ajuste linear, encontram-se na Figura 5.5. No painel (a), para $\alpha = 2$ temos $\gamma = 0$ e $h \approx 1.97$. Assim, no caso inteiro temos um decaimento puramente exponencial. No painel (b), para $\alpha = 1.6$ temos $h = 0$ e $\gamma \approx 2.614$. Assim, no caso fracionário temos um decaimento em forma de lei de potência e a potência de decaimento é aproximadamente $(\alpha + 1)$. Esta forma de lei de decaimento, do caso fracionário, é o mesmo que foi encontrado para as funções de Wannier descrito no Capítulo 4.

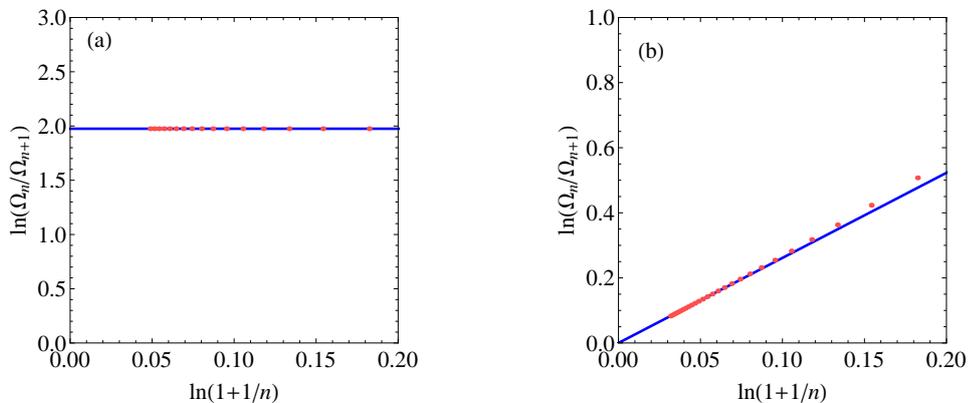


Figura 5.5: Comportamento assintótico do estado localizado de menor energia no modelo de Kronig-Penney com defeito. Os poços têm intensidade adimensional $v = -0.2$ com exceção do poço na origem que tem intensidade $v_0 = 1.1 v$. A ordem da derivada de Riesz é (a) $\alpha = 2.0$ e (b) $\alpha = 1.6$.

5.2 Cálculo dos estados localizados mediante funções de Wannier

As funções de onda na presença do defeito podem ser calculadas através de combinações das funções de Wannier do cristal perfeito, as quais formam uma base para os estados da partícula, ou seja,

$$\psi(x) = \sum_{j,n} c_{j,n} w_{j,n}(x) = \sum_{j,n} c_{j,n} w_j(x - na), \quad (5.37)$$

na qual $j \in \mathbb{Z}_+$ e $n \in \mathbb{Z}$. Substituindo esta última na equação de Schrödinger fracionária, Eq. (2.7), dada por

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x),$$

obtemos

$$\sum_{j',n'} c_{j',n'} \hat{H} w_{j',n'}(x) = E \sum_{j',n'} c_{j',n'} w_{j',n'}(x). \quad (5.38)$$

Multiplicando ambos os lados da última equação por $w_{j,n}^*(x)$ e integrando de $-\infty$ a $+\infty$, temos

$$\sum_{j',n'} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} w_{j,n}^*(x) \hat{H} w_{j',n'}(x) dx \right) c_{j',n'} = E \sum_{j',n'} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} w_{j,n}^*(x) w_{j',n'}(x) dx \right) c_{j',n'}, \quad (5.39)$$

ou seja,

$$\sum_{j',n'} H_{(j,n)(j',n')} c_{j',n'} = E \delta_{j,j'} \delta_{n,n'} c_{j',n'} \quad (5.40)$$

com

$$H_{(j,n)(j',n')} = \int_{-\infty}^{+\infty} w_{j,n}^*(x) \hat{H} w_{j',n'}(x) dx. \quad (5.41)$$

A Eq. (5.40) gera o seguinte problema de autovalores

$$\sum_{j',n'} H_{(j,n)(j',n')} c_{j',n'} = E c_{j,n}, \quad (5.42)$$

em que E é autovalor e os coeficientes $c_{j,n}$ são as coordenadas dos autovetores. Além disso, o hamiltoniano pode ser dividido em duas partes, como na Eq. (2.34), ou seja,

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -C_\alpha D^\alpha + V(x) \\
&= -C_\alpha D^\alpha + V_0 \delta\left(\frac{x}{a}\right) + \sum_{m \in \mathbb{Z}^*} V \delta\left(\frac{x}{a} + m\right) \\
&= \left[-C_\alpha D^\alpha + \sum_{m \in \mathbb{Z}} V \delta\left(\frac{x}{a} + m\right) \right] + (V_0 - V) \delta\left(\frac{x}{a}\right) \\
&= \hat{H}^{(c)} + \hat{W}
\end{aligned} \tag{5.43}$$

em que $\hat{H}^{(c)}$ é o hamiltoniano do cristal perfeito estudado no Capítulo 4 e

$$\hat{W} = \Delta V \delta\left(\frac{x}{a}\right) \tag{5.44}$$

é a perturbação devido ao defeito. Portanto,

$$H_{(j,n)(j',n')}^{(c)} = \int_{-\infty}^{+\infty} w_{j,n}^*(x) \hat{H}^{(c)} w_{j',n'}(x) dx \tag{5.45}$$

e

$$W_{(j,n)(j',n')} = \int_{-\infty}^{+\infty} w_{j,n}^*(x) \hat{W} w_{j',n'}(x) dx. \tag{5.46}$$

De um lado tem-se

$$H_{(j,n)(j',n')}^{(c)} = \frac{a}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} w_{j,n}^*(x) e^{-ikn'a} \hat{H}^{(c)} \psi_{j',k}(x) dk dx. \tag{5.47}$$

Usando a equação de Schrödinger, dada pela Eq. (4.6), tem-se

$$H_{(j,n)(j',n')}^{(c)} = \frac{a}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} w_{j,n}^*(x) e^{-ikn'a} E_{j'}(k) \psi_{j',k}(x) dk dx, \tag{5.48}$$

e, substituindo na última equação a função de onda dada pela Eq. (2.15), obtemos

$$\begin{aligned}
H_{(j,n)(j',n')}^{(c)} &= \frac{a}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} e^{-ikn'a} E_{j'}(k) w_{j,n}^*(x) \sum_{n'' \in \mathbb{Z}} e^{-ikan''} w_{j',n''}(x) dk dx \\
&= \int_{-\pi/a}^{\pi/a} e^{-ikn'a} E_{j'}(k) \delta_{j,j'} e^{ikna} dk \\
&= \delta_{j,j'} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} e^{ik(n-n')a} E_j(k) dk.
\end{aligned} \tag{5.49}$$

Do outro lado, tem-se

$$\begin{aligned}
W_{(j,n)(j',n')} &= \Delta V \int_{-\infty}^{+\infty} w_{j,n}(x - na) w_{j',n'}(x - n'a) \delta\left(\frac{x}{a}\right) dx \\
&= a \Delta V w_j(-na) w_{j'}(-n'a).
\end{aligned} \tag{5.50}$$

Para os cálculos numéricos e as comparações é conveniente levar a Eq.(5.42) à forma adimensional

$$\sum_{j',n'} h_{(j,n)(j',n')} c_{j',n'} = \epsilon c_{j,n}, \tag{5.51}$$

em que

$$\begin{aligned}
h_{(j,n)(j',n')} &= \frac{H_{(j,n)(j',n')}}{K_\alpha} \\
&= 2 \delta_{j,j'} \int_0^{\pi/a} e^{ik(n-n')a} \epsilon_j(k) dk + a \Delta v \omega_j(-n) \omega_{j'}(-n').
\end{aligned} \tag{5.52}$$

5.2.1 Resultados numéricos para os níveis de energia

Para calcular os níveis de energia mediante as funções de Wannier, resolvemos numericamente a Eq. (5.51). Em todos os casos, consideramos que a intensidade dos poços quânticos é dada por $v = -0.2$, exceto no poço quântico da origem, v_0 onde assumirá outros valores. Visando um bom acordo com o método da transformada de Fourier, quantidades relativamente grandes de bandas e de valores de n devem ser usados. Nos cálculos numéricos foram usadas funções de Wannier de 16 bandas cujos centros estão no intervalo $-40 \leq \xi \leq 40$. Com isso, a matriz diagonalizada foi de dimensão 1281×1281 , devido ao truncamento da base. Foram usados dois valores da ordem α da derivada de Riesz .

Nas Figuras 5.6 e 5.7 apresentamos os níveis de energia. Percebe-se que grande parte

dos estados está na faixa das bandas de energia do modelo periódico, o qual foi apresentado no capítulo anterior. Estes modos estão representados pelas linhas na cor cinza e correspondem a modos estendidos (não localizados). Em todos os painéis, nota-se que há níveis nos gaps. Estes foram destacados pela cor laranja e correspondem aos estados localizados.

Na Figura 5.6 apresentamos os níveis de energia dos estados localizados para o modelo de ordem $\alpha = 2.0$. No painel (a), para $v_0/v > 1$, nota-se a existência de apenas um nível de estado localizado, abaixo da banda inferior. No painel (b), em que $v_0/v < 1$, não existe nível eletrônico abaixo da banda inferior e cada nível de estado localizado está ligeiramente acima de cada banda de energia.

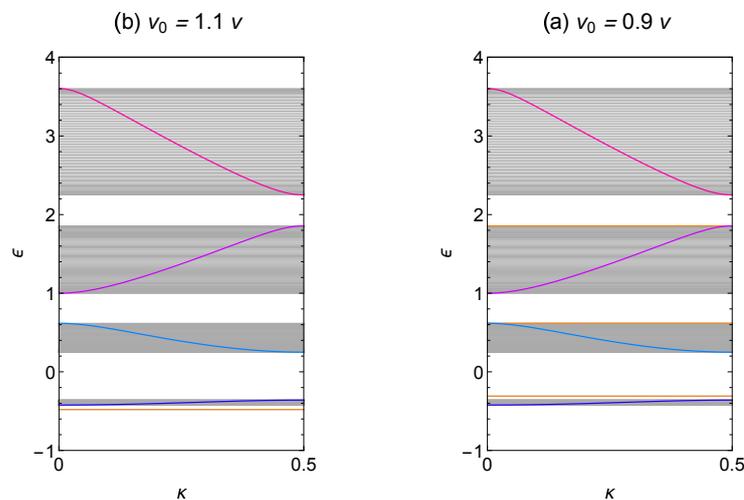


Figura 5.6: Gráfico dos níveis de energia dos estados localizados para $\alpha = 2.0$. A intensidade do potencial na origem é (a) $v_0 = 1.1 v$ e (b) $v_0 = 0.9 v$.

Na Figura 5.7 apresentamos os níveis de energia dos estados localizados para o modelo de ordem fracionária com $\alpha = 1.6$. No painel (a), em que $v_0/v > 1$, nota-se que distância entre o nível mais baixo do estado localizado e o fundo da banda inferior, aumenta ao passar da ordem $\alpha = 2.0$ para $\alpha = 1.6$. No painel (b), nota-se que distância entre o nível mais baixo e o topo da banda inferior aumenta ao passar de $\alpha = 2.0$ para $\alpha = 1.6$.

5.3 Comparação entre os dois métodos

Nesta seção apresentamos uma comparação dos resultados obtidos pelos métodos apresentados neste capítulo. Os métodos tratam de resoluções via transformada de Fourier e via funções de Wannier. A comparação é feita pela análise dos resultados do primeiro nível de energia dos estados localizados.

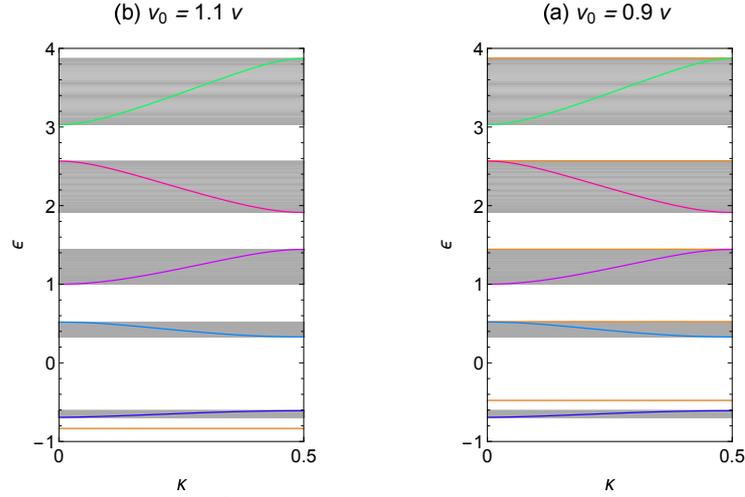


Figura 5.7: Como na Figura 5.6 mas para $\alpha = 1.6$.

Na Tabela 5.1 tem-se a comparação dos métodos para a ordem da derivada de Riesz de $\alpha = 2.0$ e 1.6 . Pode-se observar um bom acordo entre os métodos. De fato, em todos os casos, o erro é menor que 1%.

É importante ressaltar que, para uma aproximação numérica mais precisa, o método pelas funções de Wannier necessitaria de maior investimento computacional. Seria necessário ampliar o número de bandas e de células unitárias, o que implicaria em aumentar o tamanho da matriz diagonalizada.

Tabela 5.1: Comparação dos resultados para o primeiro nível de estado localizado, obtidos mediante transformada de Fourier e funções de Wannier, para $\alpha = 2.0$ e 1.6 .

Ordem	v_0	Transformada de Fourier	Funções de Wannier	Erro (%)
$\alpha = 2.0$	$1.1 v$	-0.4808	-0.4804	0.0832
	$0.9 v$	-0.3091	-0.3087	0.1294
$\alpha = 1.6$	$1.1 v$	-0.8387	-0.8347	0.4769
	$0.9 v$	-0.4806	-0.4776	0.6242

Da mesma forma, pode-se verificar que existe um bom acordo entre os métodos, ao considerar a função de onda do estado localizado. Com esse objetivo, mostramos na Figura 5.8 os gráficos da função de onda obtidos por ambos os métodos para dois valores da ordem da derivada de Riesz: $\alpha = 2.0$ e $\alpha = 1.6$. A intensidade do potencial do poço com defeito é $v_0 = 1.1 v$. Em linha contínua são representados os resultados do método da transformada de Fourier os quais já foram mostrados nas Figuras 5.3 e 5.4. Os pontos se referem ao método das funções de Wannier. Pode-se observar que os pontos estão em cima ou próximos das curvas contínuas. Isso prova o bom acordo quantitativo entre os

métodos.

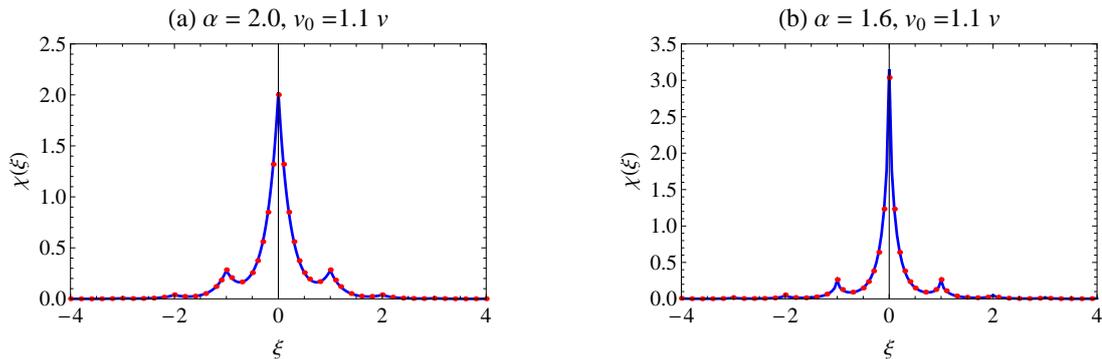


Figura 5.8: Gráfico da função de onda do estado localizado de menor energia no modelo de Kronig-Penney com defeito. A intensidade do potencial do poço com defeito é $v_0 = 1.1 v$. Comparação entre o método da transformada de Fourier (linha contínua) e o método das funções de Wannier (pontos). A ordem da derivada de Riesz é (a) $\alpha = 2.0$ e (b) $\alpha = 1.6$.

Uma comparação semelhante foi reportada recentemente pelo nosso grupo de pesquisa [77]. Fizemos uma comparação entre o método das matrizes de transferência e as funções de Wannier. O trabalho trata de equações de ondas de ordem inteira para cristais fotônicos unidimensionais com defeito.

5.4 Conclusão sobre o modelo de Kronig-Penney fracionário com defeito

Estados localizados foram calculados mediante dois métodos diferentes: (i) transformada de Fourier e (ii) funções de Wannier. Pelo método da transformada de Fourier, fez-se uma análise dos estados localizados para diferentes intensidades de potencial e para a ordem da derivada em $\alpha = 2.0$ e 1.6 . Além disso, apresentou-se as funções de onda para o primeiro nível de estado localizado. De forma semelhante ao demonstrado no Capítulo 4, para o caso inteiro as funções decaem de forma exponencial e para o caso fracionário decaem em forma de lei de potência. Para o método das funções de Wannier, fez-se uma análise nos níveis de energia. Por fim, realizamos uma comparação entre os métodos, tanto para o nível de menor energia do estado localizado, quanto para a função de onda do mesmo. É interessante notar que as funções de Wannier são mais exigentes numericamente. Em primeiro lugar as funções de Wannier precisam ser calculadas. Em segundo lugar é preciso calcular integrais que contenham as funções de Wannier. Em terceiro lugar a obtenção de resultados precisos podem requerer a diagonalização de matrizes

relativamente grandes. Como vantagens, da utilização das funções de Wannier, tem-se a flexibilidade com relação aos tipos de defeito. A troca do tipo de defeito apenas modifica os valores das integrais. Os coeficientes da combinação linear revelam imediatamente o peso que cada banda e cada célula tem na composição do estado localizado.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Esta tese apresentou uma investigação de conceitos fundamentais da estrutura eletrônica de materiais cristalinos, em uma versão unidimensional generalizada, mediante o Cálculo Fracionário. Nesse sentido, o operador de energia cinética foi considerado na forma fracionária de Riesz. Foi tratado o caso do modelo de Kronig-Penney, que é um potencial periódico unidimensional com uma delta de Dirac por período. Especificamente, analisou-se o comportamento das propriedades das bandas de energia, das funções de Bloch e de Wannier, com relação à ordem da derivada fracionária. Vale ressaltar que as funções de Wannier são conceitos fundamentais da Física do Estado Sólido e que sua aplicabilidade na Ciência dos Materiais vem crescendo apreciavelmente [23]. Aqui foi apresentada a primeira investigação das funções de Wannier para a equação de Schrödinger fracionária.

As definições das bandas de energia, das funções de Bloch e de Wannier foram usadas da forma usual. Entretanto, elas apresentam novas propriedades por conta do caráter fracionário da derivada. A fim de calcular consistentemente os estados eletrônicos e analisar seus resultados, realizou-se um estudo detalhado da derivada fracionária de Riesz e, em particular, de seu caráter não local. Isto incluiu a elaboração de ilustrações com auxílio do software *Mathematica* [73]. Convém ressaltar que a literatura apresenta debates sobre a importância de considerar o caráter não local da derivada de Riesz. De fato, alguns dos trabalhos citados trataram casos fracionários com procedimentos cuja validade está garantida apenas para derivadas de ordem inteira.

Considerando a não localidade da derivada de Riesz, resolveu-se a equação de Schrödinger fracionária para o modelo de Kronig-Penney. A linearidade e a periodicidade do operador de energia permitem obter as soluções na forma de funções de Bloch. O procedi-

mento de cálculo consiste em resolver um sistema de equações lineares para os coeficientes de Fourier da parte periódica da função de Bloch. Esse sistema equivale a um problema de autovalores que foi resolvido numericamente, por diagonalização da matriz associada ao operador de energia. A matriz é de dimensão infinita e, computacionalmente, faz-se necessário truncar a mesma. Observou-se que a convergência dos resultados é lenta, ao aumentar a dimensão da matriz truncada. Para acelerar a convergência, o problema de autovalores foi reduzido a uma equação algébrica que contém uma série que converge lentamente. Por sua vez, a convergência da série foi acelerada com auxílio da função Zeta de Lerch. Isto permitiu obter os autovalores de forma eficiente e precisa, em bom acordo com os resultados da diagonalização. Além disso, encontrou-se um bom acordo entre a banda mais baixa e o estado ligado de um único poço quântico [25], incluindo o comportamento assintótico.

A partir desses autovalores, foram calculadas as funções de Bloch e de Wannier. Observou-se que o número de bandas em um intervalo selecionado de energia aumenta à medida que a ordem da derivada fracionária de Riesz diminui, fixando a intensidade do potencial. Concomitantemente, as distribuições de probabilidade das funções de Bloch e de Wannier tornam-se mais concentradas perto dos poços quânticos. Elas exibem cúspides nas posições dos poços quânticos. Essas cúspides ficam mais acentuadas quando a ordem da derivada diminui. Fez-se um estudo detalhado do comportamento assintótico das funções de Wannier e verificou-se ausência de um decaimento exponencial para o caso fracionário e um aumento apreciável do grau de decaimento em forma de lei de potência. O valor absoluto de cada função de Wannier simétrica (antissimétrica) na n -ésima célula decai como $|n|^{-\gamma}$, onde $\gamma = \alpha + 1$ ($\gamma = \alpha + 2$). Isso foi explicado como uma consequência da não suavidade das bandas e das funções de Bloch no ponto Γ . Além disso, foram obtidas fórmulas simples para as caudas das funções de Wannier.

Para completar a análise, variou-se a intensidade do potencial e fixou-se o valor da ordem da derivada. Para a ordem de derivação inteira, observou-se que a monotonicidade das bandas se mantém e a largura das bandas na janela de energia diminui, à medida que o potencial se intensifica. Como fato interessante, tem-se que no caso fracionário esta característica é modificada em um certo valor da intensidade do potencial. Acima desse valor, a largura das bandas aumenta novamente mas com a sua monotonicidade invertida. Nas funções de Wannier observou-se que o grau de localização depende da intensidade do

potencial. Para o caso fracionário, há inicialmente um aumento da localização da função e posteriormente uma diminuição. Este comportamento é similar ao da largura das bandas de energia.

Para finalizar a investigação, foi resolvida a equação de Schrödinger, com energia cinética na forma de Riesz, para um potencial que é soma de uma função periódica e outra localizada, que representa um defeito do potencial. Fez-se um estudo sobre os níveis de energia dos estados localizados e as funções de onda do primeiro nível de energia. O cálculo foi realizado por dois métodos: transformada de Fourier e funções de Wannier. Por fim, fez-se uma comparação entre os métodos para o primeiro estado localizado. Verificou-se um bom acordo entre os mesmos e se observou que a função de onda decai como lei de potência.

Como continuidade deste trabalho pode-se resolver a equação de Schrödinger com energia cinética na forma de Riesz para outros tipos de potenciais, por exemplo, utilizando uma Gaussiana em lugar do delta de Dirac. Pode-se resolver problemas incluindo potenciais bi [68] e tridimensionais [78] e potenciais sem simetria de inversão, com o objetivo de modelar sistemas mais realistas da Ciência de Materiais. Além disso, pode-se investigar a utilização desta ou outras versões das derivadas fracionárias, estender a teoria de massa efetiva e a teoria de sistemas desordenados. Para este último caso, seria importante verificar se a desordem também produz decaimento em forma de lei de potência. Espera-se que os resultados apresentados nesta tese possam impactar o trabalho de pesquisadores nesta área e ampliem o leque de aplicações do Cálculo Fracionário à Física e à Ciência dos Materiais. Nessa linha, será importante identificar sistemas e regimes em que os modelos fracionários simplifiquem, de maneira efetiva, o tratamento matemático do problema.

Apêndice A

Análise de Fourier

Nesta seção apresentamos brevemente, na perspectiva da Álgebra Linear, duas teorias que são pontos de partida da área de Análise de Fourier (também chamada de Análise Harmônica). A série de Fourier nos permite representar funções periódicas, a transformada de Fourier permite representar funções arbitrárias na reta real [79].

Em meados do século XIX Fourier (Jean Baptiste Joseph Fourier, [1768 – 1830]) físico, matemático e engenheiro, quando estudava sobre a propagação do calor afirmou, na publicação “*Mémoire sur la théorie de la chaleur*”, que pode-se representar funções por séries em função de seno e cosseno ou de exponenciais complexas. Apesar do formalismo incipiente da época, sua descoberta chamou a atenção de outros estudiosos como Johann Peter Gustav Lejeune Dirichlet (1805-1859) e Georg Friedrich Bernhard Riemann (1826-1866). Estes deram aos resultados de Fourier mais precisão e rigor, ao perceberem a preciosidade da pesquisa e seu vasto ramo de aplicabilidade.

Atualmente, a Análise de Fourier está presente no processamento de imagens e de sinais, em aplicações de Física, Probabilidade e Estatística, nas músicas eletrônicas e em diversas frequências características de instrumentos musicais, sejam eles naturais ou artificiais [79].

A.1 Série de Fourier

A.1.1 Forma complexa da série de Fourier

Em algumas situações a forma complexa da série de Fourier é mais conveniente, tornando mais simples a resolução dos problemas. Dessa forma, podemos expressar uma

função $f(x)$, real ou complexa, de período L , como combinação linear de exponenciais de período L . Isto é,

$$f(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} C_n e^{2n\pi i x/L}, \quad (\text{A.1})$$

que é uma série de Fourier complexa. Aqui C_n é o n -ésimo coeficiente da série de Fourier de $f(x)$, e é dado pela fórmula

$$C_n = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} f(x) e^{-2n\pi i x/L} dx. \quad (\text{A.2})$$

A.2 Transformada de Fourier

Seja $g(x)$ uma função complexa ou real definida em $(-\infty, \infty)$. A sua transformada de Fourier, denotada por $G(k)$, é definida pela integral

$$G(k) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) e^{-ikx} dx,$$

desde que a integral exista. A transformada de Fourier inversa é dada por

$$g(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(k) e^{ikx} dk,$$

desde que a integral exista.

O operador que realiza a transformada de Fourier é denotado por \mathcal{F} e é tal que $\mathcal{F}(g(x)) = G(k)$. O operador da transformada inversa de Fourier é $\mathcal{F}^{-1}(G(k)) = g(x)$.

Como exemplo apresentaremos a transformada da derivada primeira de $\psi(x)$ e a transformada da derivada segunda de $\psi(x)$. Isto simplifica uma demonstração feita no Capítulo 3. Usaremos

$$\phi(k) = \mathcal{F}(\psi(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \psi(x) dx, \quad (\text{A.3})$$

e

$$\psi(x) = \mathcal{F}^{-1}(\phi(k)) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \phi(k) dk. \quad (\text{A.4})$$

como no Capítulo 2.

Transformada da derivada primeira

Resolvendo por partes, temos:

$$\mathcal{F}(\psi'(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \psi'(x) dx = ik\phi(k) = ik \mathcal{F}(\psi(x)). \quad (\text{A.5})$$

Transformada da derivada segunda

Resolvendo por partes, temos:

$$\mathcal{F}(\psi''(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \psi''(x) dx = ikik\phi(k) = -k^2\phi(k) = -k^2 \mathcal{F}(\psi(x)). \quad (\text{A.6})$$

Apêndice B

Autovalores e autovetores

Álgebra Linear é um ramo da Matemática em que se estudam conceitos fundamentais tais como Matrizes, Espaços Vetoriais e Transformações Lineares. Dentre os conceitos da Álgebra Linear, dois serão destacados nesta seção: autovalores¹ e autovetores, também denominados valores próprios, valores característicos, valores latentes e vetores próprios, vetores característicos e vetores latentes, respectivamente. Em inglês os autovalores e autovetores são chamados de *eigenvalues* e *eigenvectors* respectivamente, em que há uma combinação de idiomas, pois o prefixo *eigen* é alemão, significando próprio, característico [81].

A determinação de autovalores e autovetores de uma matriz são conceitos essenciais em aplicações práticas de várias áreas, tais como [82]:

- Mecânica Quântica;
- processamento de imagens;
- análise de vibrações (de asas de aviões e de pontes ou outra estrutura sólida, de mecânica ou elétrica, dos tipos macroscópica ou microscópica);
- mecânica dos sólidos;
- estatística;
- teoria dos operadores diferenciais e integrais.

¹A palavra autovalor aparentemente foi utilizada pela primeira vez, por volta de 1904, pelo matemático alemão David Hilbert [1862 - 1943], ao tratar equações integrais e, logo depois, no contexto de matrizes [80].

Muitas das aplicações envolvem o uso de autovalores e autovetores no processo de transformar uma determinada matriz em uma matriz diagonal. Dessa forma esta seção apresenta alguns teoremas e definições de autovalores, autovetores e diagonalização de operadores, que nos auxiliarão a compreender a utilização destas ferramentas.

B.1 Autovalores e autovetores

Definição: Seja A uma matriz $n \times n$ de números complexos. O número complexo λ é **autovalor** de A se existir um vetor não-nulo em \mathbb{C}^n tal que $A\vec{v} = \lambda\vec{v}$. Dessa forma, qualquer vetor não-nulo que satisfaça $A\vec{v} = \lambda\vec{v}$ é **autovetor** de A associado ao autovalor λ [80, 83].

Na Figura B.1 são ilustrados seis diferentes configurações relativas entre o autovetor, \vec{v} , e sua imagem, $T(\vec{v}) = A\vec{v}$, para valores distintos e reais do autovalor λ . Embora não foi incluído, o caso $T(\vec{v}) = \vec{0}$ define os autovetores para $\lambda = 0$. Na Figura, B.2, tem-se a representação de um vetor \vec{v} que não é autovetor de $T(\vec{v})$.

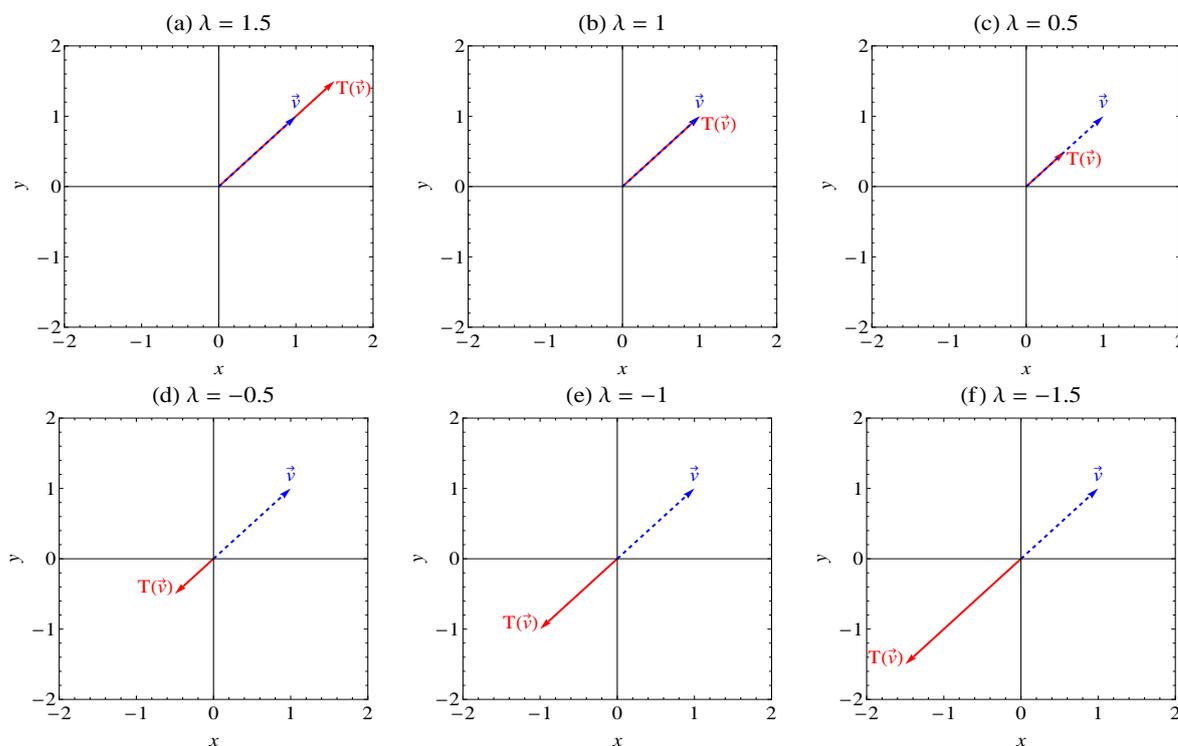


Figura B.1: Ilustração de autovetores para diferentes valores de λ .

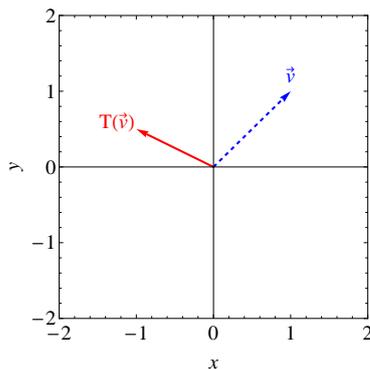


Figura B.2: Ilustração do caso em que \vec{v} não é autovetor de $T(\vec{v})$.

B.1.1 Polinômio característico

Pode-se reescrever $A\vec{v} = I\vec{v}$ com I sendo a matriz identidade $n \times n$, logo:

$$A\vec{v} = \lambda\vec{v} \Leftrightarrow A\vec{v} - I\lambda\vec{v} = \vec{0} \text{ ou } (A - I\lambda)\vec{v} = \vec{0}.$$

Definição: Dada uma matriz A , $n \times n$, chama-se polinômio característico de A , denotado por $P_c(\lambda)$, ao determinante

$$\det(A - I\lambda) = (\lambda - \lambda_1)^{m_1}(\lambda - \lambda_2)^{m_2} \dots (\lambda - \lambda_k)^{m_k},$$

onde $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ são as raízes da equação $P_c(\lambda) = 0$. Eles são os autovalores de A . Se $P_c(\lambda)$ for de grau n tem-se $m_1 + m_2 + \dots + m_k = n$. Além disso, os autovetores associados a λ são os vetores não nulos que satisfazem $(A - I\lambda)\vec{v} = \vec{0}$ [80, 83].

B.1.2 Multiplicidade dos autovalores

Definição: Seja λ um autovalor de uma matriz quadrada A de ordem n [80, 84].

a) A multiplicidade algébrica de λ , $\alpha(\lambda)$, é a quantidade de vezes que ele aparece como raiz do polinômio característico.

b) A multiplicidade geométrica, $\gamma(\lambda)$, de λ é a dimensão do seu autoespaço².

c) De modo geral $\gamma(\lambda) \leq \alpha(\lambda)$; caso contrário não é possível determinar autovetores $\{\vec{v}_1; \vec{v}_2; \dots; \vec{v}_n\}$ linearmente independentes.

²Define-se autoespaço de λ como o conjunto formado pelo vetor nulo e todos autovetores associados a λ .

B.2 Diagonalização de operadores

Esta seção apresenta sob quais condições um operador linear poderá ser representado matricialmente, associado a determinada base, da forma mais simples possível. A forma mais simples de trabalhar será utilizando as matrizes diagonais. Isto é importante para estudos das funções de Wannier [80, 83].

B.2.1 Matrizes Semelhantes

Definição: Se A e B são matrizes quadradas de mesma ordem, dizemos que uma matriz B é semelhante a uma matriz A , se existir uma matriz P invertível tal que $B = P^{-1}AP$.

Observação: Se B é semelhante a A , então é certo que A é semelhante a B . Por isso diz-se que A e B são semelhantes.

Teorema³: Duas matrizes são semelhantes se, e somente se, existem bases em relação às quais as matrizes representam o mesmo operador linear.

As matrizes semelhantes compartilham de algumas propriedades. Algumas dessas foram agrupadas no teorema a seguir.

Teorema da invariância: Se A e B são matrizes quadradas e semelhantes [80], então:

- têm o mesmo determinante;
- têm o mesmo traço⁴;

B.2.2 Diagonalização

Tendo conhecimento da definição das matrizes semelhantes, como na definição (B.2.1), e existindo a matriz P invertível que diagonaliza A , diz-se que A é diagonalizável. Com isso, apresentamos agora métodos para diagonalizar uma matriz e um teorema cuja demonstração encontra-se em [80].

³A demonstração encontra-se em [80].

⁴O *traço* de uma matriz é a soma dos elementos de sua diagonal [84].

Teorema: Uma matriz A , $n \times n$, é diagonalizável se, e somente se, A tem n autovetores linearmente independentes [80].

Método para diagonalizar uma matriz [80]:

- **Passo 1:** Deve-se encontrar n autovetores linearmente independentes de A , ou seja, $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n$.
- **Passo 2:** Deve-se montar a matriz

$$P = \begin{pmatrix} \vec{v}_1 & \vec{v}_2 & \cdots & \vec{v}_n \end{pmatrix},$$

cujas colunas são os n autovetores.

- **Passo 3:** Encontra-se a matriz diagonal $P^{-1}AP = D$ cujos elementos sobre a diagonal são os n autovalores de A que correspondem às colunas de P .

B.3 Transformações hermitianas

Uma matriz quadrada A é definida como **matriz hermitiana** quando coincide com sua transposta conjugada $A^\dagger = (A^T)^*$, ou seja, quando $A = A^\dagger$. Como consequência, os números da diagonal principal são reais.

Toda matriz hermitiana, tem as seguintes propriedades:

- Seus autovalores são reais.
- Se v e u são dois autovetores associados a autovalores distintos, então u e v são ortogonais, ou seja, o seu produto escalar, $\langle u, v \rangle$, é nulo.

No caso particular de um espaço vetorial de funções complexas que tomam valores em um intervalo $[a, b]$, o produto escalar das funções u e v é dado por

$$\langle u, v \rangle = \int_a^b u^*(x)v(x)dx. \quad (\text{B.1})$$

Um conjunto de funções u_j , enumeradas pelo índice j , é ortogonal no intervalo $[a, b]$ quando $\langle u_j, u_{j'} \rangle = 0$, para $j \neq j'$. Uma função u está normalizada no intervalo $[a, b]$ quando $\langle u, u \rangle = 1$. Um conjunto de funções u_j , enumeradas pelo índice j , é ortonormal

no intervalo $[a, b]$, quando

$$\langle u_j, u_{j'} \rangle = \delta_{j,j'} = \begin{cases} 1, & \text{se } j = j' \\ 0, & \text{se } j \neq j'. \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

Em outras palavras, um conjunto ortonormal de funções é um conjunto ortogonal de funções normalizadas.

Apêndice C

Delta de Dirac e degrau de Heaviside

C.1 *Função* delta de Dirac

O engenheiro elétrico e matemático Paul Dirac [1902 - 1984] apresentou, em seu livro “*Principles of Quantum Mechanics*”(1930), a *função* delta $\delta(x)$, também conhecida como função impulso, com a finalidade de facilitar algumas operações da física matemática [85–87]. Entretanto, por não se tratar de uma função de fato, causou inquietação entre os matemáticos. Dez anos depois, em 1940, o matemático francês Laurent Schwartz [1915 - 2002] estudou e desenvolveu a teoria de distribuições, a qual formaliza e generaliza a teoria da função delta de Dirac [86].

Neste trabalho optamos por tratar a $\delta(x)$ como função com um comportamento inusual na vizinhança do ponto $x = 0$. Nesta vizinhança ela não é diferenciável, não é contínua e não é limitada. Fora da vizinhança é identicamente nula [85]. Neste sentido, a *função* delta de Dirac é definida como [87]

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \neq 0 \\ +\infty & \text{se } x = 0, \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

na qual, x é real, com [87, 88]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (\text{C.2})$$

C.1.1 Propriedades da delta de Dirac

A *função* delta de Dirac possui as seguintes propriedades:

- **Filtragem:**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)f(x)dx = f(a), \quad (\text{C.3})$$

se $f(x)$ é contínua em $x = a$. Esta equivale a

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a). \quad (\text{C.4})$$

- **Paridade:**

$$\delta(x) = \delta(-x). \quad (\text{C.5})$$

- **Escala:**

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x), \text{ para } a \neq 0. \quad (\text{C.6})$$

- **Transformada de Fourier:**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(t)e^{-ikt} dt = e^{-ik0} = 1. \quad (\text{C.7})$$

- **Transformada de Fourier inversa:**

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikt} dk. \quad (\text{C.8})$$

C.1.2 Delta de Kronecker

A *função* delta de Dirac tem como argumento uma variável contínua. Em muitas aplicações aparece $\delta(x-a)$, com a propriedade C.3. Seu análogo no domínio dos inteiros é o delta de Kronecker.

Pode-se definir nos inteiros a função tal que

$$\delta_x = \begin{cases} 0, & \text{se } x \neq 0 \\ 1, & \text{se } x = 0. \end{cases} \quad (\text{C.9})$$

Dessa maneira,

$$\delta_{x-a} = \begin{cases} 0, & \text{se } x \neq a \\ 1, & \text{se } x = a. \end{cases} \quad (\text{C.10})$$

Usualmente, a delta de Kronecker é definida por

$$\delta_{x,a} = \delta_{x-a}. \quad (\text{C.11})$$

Convém notar que, para cada inteiro a , vale

$$\sum_{x \in \mathbb{Z}} f(x) \delta_{x,a} = f(a). \quad (\text{C.12})$$

C.2 Função de Heaviside

A função degrau unitário ou função degrau de Heaviside, $\Theta(x)$, deve seu nome ao cientista inglês Oliver Heaviside [1850-1925]. Essa função é tão importante quanto o impulso unitário, que é representado pela delta de Dirac. O degrau é definido matematicamente por [85–87, 89]

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ 1/2 & \text{se } x = 0 \\ 1 & \text{se } x > 0. \end{cases} \quad (\text{C.13})$$

Consequentemente, de maneira mais geral, vale [85–87]

$$\Theta(x - a) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < a \\ 1/2 & \text{se } x = a \\ 1 & \text{se } x > a. \end{cases} \quad (\text{C.14})$$

C.3 Função Heaviside \times função delta de Dirac

No contexto do cálculo diferencial a derivada $\Theta'(x)$ seria nula para todo $x \neq 0$ e não seria definida na origem. Entretanto, na física matemática se tornou necessário definir a derivada de $\Theta(x)$ em toda a reta real, a saber, verifica-se que¹ [85, 86],

$$\delta(x) = \frac{d}{dx} \Theta(x).$$

Esta relação reforça que a *função* delta de Dirac não é uma função, dado que o lado direito da igualdade é a derivada de uma função descontínua [85, 86].

¹A demonstração desta relação encontra-se em [86].

Apêndice D

Poço delta na equação de Schrödinger fracionária de Riesz

O caso de um poço delta na equação de Schrödinger fracionária de Riesz foi resolvido originalmente por Capelas de Oliveira *et al.* [25]. Neste apêndice, para facilitar as comparações necessárias, o apresentamos com as nossas notações e detalhes complementares.

A equação que pretende-se resolver é a Eq. (2.33). Esta é a equação de Schrödinger fracionária independente do tempo, dada por

$$-C_\alpha D^\alpha \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

para o potencial $V(x) = -W\delta(x)$, em que W é uma constante.

Aplicando a transformada de Fourier em ambos os lados da equação, tem-se

$$C_\alpha |k|^\alpha \phi(k) - W\psi(0) = E\phi(k), \tag{D.1}$$

ao colocar $\phi(k)$ em evidência, tem-se

$$(C_\alpha |k|^\alpha - E)\phi(k) = W\psi(0). \tag{D.2}$$

Considerando o caso em que $E < 0$, obtemos

$$\phi(k) = \frac{W\psi(0)}{C_\alpha |k|^\alpha - E}. \tag{D.3}$$

Substituindo a Eq. (D.3) na transformada inversa de $\phi(k)$, tem-se

$$\psi(x) = \mathcal{F}^{-1}(\phi(k)) = \frac{W\psi(0)}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ikx} dk}{C_\alpha |k|^\alpha - E}. \quad (\text{D.4})$$

Em particular, para $x = 0$ vale

$$\psi(0) = \frac{W\psi(0)}{2\pi C_\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{|k|^\alpha - \frac{E}{C_\alpha}}. \quad (\text{D.5})$$

Se $\psi(0)$ fosse nula, a função de onda seria nula em toda a reta, o que não pode acontecer. Como $\psi(0) \neq 0$, obtemos a equação que permite calcular as bandas de energia, ou seja,

$$\frac{W}{2\pi C_\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{|k|^\alpha - \frac{E}{C_\alpha}} = 1. \quad (\text{D.6})$$

Por simetria, pode-se reescrever esta na forma

$$\frac{W}{\pi C_\alpha} \int_0^{+\infty} \frac{dk}{|k|^\alpha - \frac{E}{C_\alpha}} = 1. \quad (\text{D.7})$$

Considerando que a energia é negativa, convém fazer a substituição

$$\frac{E}{C_\alpha} = -h^\alpha, \quad (\text{D.8})$$

e reescrever a Eq. (D.7) como

$$\frac{W}{\pi C_\alpha} \int_0^{+\infty} \frac{dk}{|k|^\alpha + h^\alpha} = 1. \quad (\text{D.9})$$

Substituindo $t = k/h$, obtém-se

$$\frac{W}{\pi C_\alpha h^{\alpha-1}} \int_0^{+\infty} \frac{dt}{t^\alpha + 1} = 1. \quad (\text{D.10})$$

Portanto, temos

$$h = \left(\frac{W I_\alpha}{C_\alpha \pi} \right)^{\frac{1}{\alpha-1}}, \quad (\text{D.11})$$

em que I_α é calculado mediante a fórmula 3.241.2 (p. 322) da Ref. [74], a saber

$$I_\alpha = \int_0^{+\infty} \frac{dt}{t^\alpha + 1} = \frac{\pi}{\alpha} \csc\left(\frac{\pi}{\alpha}\right). \quad (\text{D.12})$$

Combinando as Eqs. (D.8) e (D.11), encontra-se a seguinte solução para a energia

$$E = -C_\alpha h^\alpha = -C_\alpha \left(\frac{WI_\alpha}{C_\alpha \pi} \right)^{\frac{\alpha}{\alpha-1}}. \quad (\text{D.13})$$

A função de onda, dada pela Eq. (D.4), pode ser simplificada por simetria. O resultado é

$$\psi(x) = \frac{W\psi(0)}{\pi C_\alpha} \int_0^{+\infty} \frac{\cos(kx)dk}{k^\alpha + h^\alpha}. \quad (\text{D.14})$$

Substituindo $t = k/h$, temos

$$\psi(x) = \frac{W\psi(0)}{\pi C_\alpha h^{\alpha-1}} \int_0^{+\infty} \frac{\cos(hxt)dt}{t^\alpha + 1}. \quad (\text{D.15})$$

De acordo com as Eqs. (D.10) e (D.12), temos

$$\psi(x) = \psi(0) \frac{F_\alpha(hx)}{I_\alpha}, \quad (\text{D.16})$$

em que

$$F_\alpha(y) = \int_0^{+\infty} \frac{\cos(yt)dt}{t^\alpha + 1}. \quad (\text{D.17})$$

A Eq. (D.17) foi resolvida nos trabalhos [25, 26], tomando as transformadas de Mellin e usando a definição da função H de Fox. Neste trabalho, quando necessário, a integral é avaliada numericamente. Esta é uma alternativa ao desenvolvimento de rotinas numéricas de avaliação da função de Fox. Avaliando a Eq. (D.17) em $y = 0$, resulta que

$$F_\alpha(0) = I_\alpha. \quad (\text{D.18})$$

Ainda devemos calcular $\psi(0)$, a fim de normalizar a função de onda. A condição de normalização é definida pela Eq. (2.4), isto é,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad (\text{D.19})$$

que é equivalente a

$$\frac{|\psi(0)|^2}{I_\alpha^2} \int_{-\infty}^{+\infty} F_\alpha^2(hx) dx = 1. \quad (\text{D.20})$$

Fazendo a substituição $y = hx$ e, sem perder generalidade, escolhendo $\psi(0) > 0$, obtemos

$$\psi(0) = \frac{I_\alpha \sqrt{h}}{\sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} F_\alpha^2(y) dy}}. \quad (\text{D.21})$$

A integral no denominador pode ser calculada como segue:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} F_\alpha^2(y) dy &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_0^{+\infty} \frac{\cos(yt) dt}{t^\alpha + 1} \right)^2 dy \\ &= \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-iyt} dt}{t^\alpha + 1} \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iyu} du}{u^\alpha + 1} \right) dy \\ &= \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iy(u-t)} dy}{(t^\alpha + 1)(u^\alpha + 1)} \right) du dt. \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

De acordo com a Eq. (C.8), obtemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iy(u-t)} dy = 2\pi\delta(u-t). \quad (\text{D.23})$$

Portanto, vale

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} F_\alpha^2(y) dy &= \frac{\pi}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\delta(u-t) du dt}{(t^\alpha + 1)(u^\alpha + 1)} \\ &= \frac{\pi}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{(t^\alpha + 1)} \\ &= \pi \int_0^{+\infty} \frac{dt}{(t^\alpha + 1)}. \end{aligned} \quad (\text{D.24})$$

Com o auxílio da fórmula 3.241.5 (p. 322) da Ref. [74], obtemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F_\alpha^2(y) dy = \pi \frac{(1-\alpha)\pi}{\alpha^2} \csc\left(\frac{\pi}{\alpha} - \pi\right) = \frac{\pi^2(\alpha-1)}{\alpha^2} \csc\left(\frac{\pi}{\alpha}\right). \quad (\text{D.25})$$

Levando em conta a Eq. (D.12), conclui-se que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F_\alpha^2(y) dy = \frac{\pi}{\alpha}(\alpha-1)I_\alpha. \quad (\text{D.26})$$

Finalmente, combinando as Eqs.(D.21) e (D.26), obtemos que

$$\frac{\psi(0)}{I_\alpha} = \sqrt{\frac{\alpha h}{\pi(\alpha - 1)I_\alpha}}. \quad (\text{D.27})$$

Então, combinando as Eq. (D.16) e (D.27), concluímos que a função de onda é

$$\psi(x) = F_\alpha(hx) \sqrt{\frac{\alpha h}{\pi(\alpha - 1)I_\alpha}}. \quad (\text{D.28})$$

Apêndice E

Solução do modelo de Kronig-Penney de ordem inteira

A equação que pretende-se resolver é a Eq. (2.6). Aqui adotamos $C_2 = \frac{\hbar^2}{2m}$ para simplificar os cálculos. Trata-se da equação de Schrödinger unidimensional estacionária (independente do tempo), de ordem 2,

$$\left[-C_2 \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x),$$

na qual o potencial é da forma

$$V(x) = V \sum_{m \in \mathbb{Z}} \delta\left(\frac{x}{a} - m\right),$$

como apresentado no Capítulo 2.

Para x no intervalo $(0, a)$, temos

$$-C_2 \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \tag{E.1}$$

ou seja,

$$\psi''(x) = \frac{E}{-C_2} \psi(x). \tag{E.2}$$

Introduzindo o número Q , real ou imaginário, tal que

$$Q^2 = \frac{E}{-C_2}, \tag{E.3}$$

tem-se que a Eq. (E.2) passa a ser a seguinte equação diferencial

$$\psi''(x) = Q^2\psi(x). \quad (\text{E.4})$$

Sua solução geral é dada da forma

$$\psi(x) = A \cos(Qx) + B \sin(Qx), \quad (\text{E.5})$$

e a sua derivada é

$$\psi'(x) = Q[-A \sin(Qx) + B \cos(Qx)]. \quad (\text{E.6})$$

Da condição de Bloch, Eq. (2.9), temos

$$\psi_k(x+a) = e^{ika}\psi_k(x). \quad (\text{E.7})$$

Nesta, tomando o limite para $x \rightarrow 0^+$, temos

$$\psi(a^+) = e^{ika}\psi(0^+), \quad (\text{E.8})$$

e como a função de onda é contínua

$$\psi(a) = \lim_{x \rightarrow a^+} \psi(x) = \lim_{x \rightarrow a^-} \psi(x) \quad (\text{E.9})$$

$$= \psi(a^+) = \psi(a^-). \quad (\text{E.10})$$

O que implica em

$$\psi(a^-) = e^{ika}\psi(0^+). \quad (\text{E.11})$$

Combinando a Eq. (E.5) e a Eq. (E.11), obtém-se

$$A \cos(Qa) + B \sin(Qa) = e^{ika}A. \quad (\text{E.12})$$

Derivando a Eq. (E.7), obtemos que a derivada da função de Bloch satisfaz a mesma condição, ou seja,

$$\psi'(x+a) = e^{ika}\psi'(x), \quad (\text{E.13})$$

então, vale

$$\psi'(a^+) = e^{ika}\psi'(0^+). \quad (\text{E.14})$$

A derivada da função de onda não precisa ser contínua, isto depende do potencial. Para determinar seu comportamento na vizinhança de $x = a$, convém integrar ambos lados da equação de Schrödinger de $a - \sigma$ até $a + \sigma$, com $0 < \sigma < a$, e tomar o limite $\sigma \rightarrow 0^+$. Isto é,

$$-C_2 \int_{a-\sigma}^{a+\sigma} \psi''(x)dx + \int_{a-\sigma}^{a+\sigma} V\delta\left(\frac{x}{a} - 1\right)\psi(x)dx = E \int_{a-\sigma}^{a+\sigma} \psi(x)dx, \quad (\text{E.15})$$

que equivale a

$$-C_2\psi'(x)|_{a-\sigma}^{a+\sigma} + \int_{a-\sigma}^{a+\sigma} Va\delta(x-a)\psi(x)dx = E \int_{a-\sigma}^{a+\sigma} \psi(x)dx. \quad (\text{E.16})$$

Tomando o valor médio da função de onda no intervalo $[a - \sigma, a + \sigma]$, resulta na equação

$$-C_2[\psi'(a + \sigma) - \psi'(a - \sigma)] + aV\psi(a) = 2\sigma E\langle\psi(x)\rangle_{[a-\sigma, a+\sigma]}. \quad (\text{E.17})$$

Portanto, quando $\sigma \rightarrow 0^+$, temos

$$-C_2[\psi'(a^+) - \psi'(a^-)] + aV\psi(a) = 0, \quad (\text{E.18})$$

ou seja,

$$\psi'(a^+) = \psi'(a^-) + \frac{aV}{C_2}\psi(a). \quad (\text{E.19})$$

Então, substituindo a Eq. (E.14) na Eq. (E.19),

$$e^{ika}\psi'(0^+) = \psi'(a^-) + \frac{aV}{C_2}\psi(a). \quad (\text{E.20})$$

Substituindo as Eq. (E.5) e (E.6) na Eq. (E.20), obtemos

$$Q[-A \operatorname{sen}(Qa) + B \operatorname{cos}(Qa)] + \frac{aV}{C_2}[A \operatorname{cos}(Qa) + B \operatorname{sen}(Qa)] = e^{ika}QB. \quad (\text{E.21})$$

As Eqs. (E.12) e (E.21) formam um sistema de equações lineares homogêneas para A

e B . Para simplificar, denotamos $c = \cos(Qx)$ e $s = \sin(Qx)$, e o sistema adota a forma

$$\begin{cases} (c - e^{ika})A + sB = 0 \\ \left(\frac{aVc}{C_2} - Qs\right)A + \left(Qc + \frac{aVs}{C_2} - Qe^{ika}\right)B = 0. \end{cases} \quad (\text{E.22})$$

Como A e B não podem anular-se simultaneamente (para evitar que a função de onda seja identicamente nula), o determinante do sistema deve ser nulo. Assim, chegamos nas seguintes equações equivalentes

$$\begin{aligned} (c - e^{ika}) \left(Qc + \frac{aVs}{C_2} - Qe^{ika} \right) &= s \left(\frac{aVc}{C_2} - Qs \right), \\ Q(e^{ika} - c)^2 + \frac{aVs}{C_2}(c - e^{ika}) &= \frac{aVcs}{C_2} - Qs^2, \\ Q[s^2 + (e^{ika} - c)^2] &= \frac{aVs}{C_2}e^{ika}, \\ Q[s^2 + c^2 - 2ce^{ika} + e^{2ika}] &= \frac{aVs}{C_2}e^{ika}, \end{aligned} \quad (\text{E.23})$$

e

$$Q[1 - 2ce^{ika} + e^{2ika}] = \frac{aVs}{C_2}e^{ika}. \quad (\text{E.24})$$

Dividindo por e^{ika} ambos os lados da Eq. (E.24), obtemos:

$$Q[e^{ika} + e^{-ika} - 2c] = \frac{aVs}{C_2}, \quad (\text{E.25})$$

então

$$2Q[\cos(ka) - c] = \frac{aVs}{C_2}, \quad (\text{E.26})$$

ou seja,

$$Q[\cos(ka) - \cos(Qa)] = \frac{aV}{2C_2} \sin(Qa). \quad (\text{E.27})$$

Como solução imediata, tem-se $Q = 0$, ou seja, $E = 0$. Há outras soluções da forma $Qa = n\pi$, com $n \in \mathbb{Z}^*$, desde que $\cos(ka) = (-1)^n$, que acontece em $k = (n + 2m)\frac{\pi}{a}$. As soluções restantes, com $Qa \neq n\pi$, determinam a forma das bandas e satisfazem

$$\frac{C_2}{V} = \frac{a}{2Q} \cdot \frac{\sin(Qa)}{\cos(ka) - \cos(Qa)}, \quad (\text{E.28})$$

ou seja, substituindo a Eq. (E.3),

$$\frac{C_2}{V} = \frac{a}{2} \cdot \sqrt{\frac{C_2}{E}} \cdot \frac{\text{sen}(Qa)}{\cos(ka) - \cos(Qa)}. \quad (\text{E.29})$$

Passando à forma adimensional, utilizando $E = \epsilon C_2 \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$, $V = v C_2 \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$ e $k = \kappa \frac{2\pi}{a}$, obtém-se

$$\frac{1}{v} \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 = \frac{a}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \cdot \frac{a}{2\pi} \cdot \frac{\text{sen}(2\pi\sqrt{\epsilon})}{\cos(2\pi\kappa) - \cos(2\pi\sqrt{\epsilon})}, \quad (\text{E.30})$$

ou seja,

$$\frac{1}{v} = \frac{\pi \text{sen}(2\pi\sqrt{\epsilon})}{\sqrt{\epsilon}[\cos(2\pi\kappa) - \cos(2\pi\sqrt{\epsilon})]} \quad (\text{E.31})$$

Comparando com a Eq.(4.30), conclui-se que para $\alpha = 2$ vale

$$G(\epsilon, \kappa) = \frac{\pi \text{sen}(2\pi\sqrt{\epsilon})}{\sqrt{\epsilon}[\cos(2\pi\kappa) - \cos(2\pi\sqrt{\epsilon})]}. \quad (\text{E.32})$$

Apêndice F

Aceleração da série $G(\epsilon, \kappa, \xi)$

Na ciência há muitos problemas cujas soluções são expressas mediante séries, tais como as séries de Taylor e as séries de Fourier [90]. Na teoria dos números, a função zeta de Riemann, $\zeta(s)$, é usualmente definida por uma série [91].

Há casos em que o valor limite da série não pode ser calculado de forma exata, ou em que não é conhecido tal procedimento. Isto faz com que precisemos utilizar métodos numéricos. Nesses cálculos, as séries são muitas vezes aproximadas mediante truncamento até os N primeiros termos. Algumas séries convergem rapidamente, tais como $\zeta(3)$, cujo erro de truncamento tende a zero como $1/N^2$. Outras convergem devagar, tais como $\zeta(3/2)$, cujo erro tende a zero como $1/\sqrt{N}$. No caso das séries que convergem lentamente, faz-se necessário utilizar métodos de aceleração da convergência.

No século XIX, Mathias Lerch [92, 93] e Rudolf O. S. Lipschitz [94, 95], estudaram a função que recebe o nome de função zeta de Lerch. Ela também é chamada de função zeta de Lerch-Lipschitz, por alguns estudiosos [96]. Há outras funções que são casos particulares desta e que têm importância na Matemática, tais como a função zeta de Hurwitz e a função zeta de Riemann.

A função transcendente de Lerch é uma generalização da função zeta de Lerch. Tais funções têm aplicações na termodinâmica de gases ideais quânticos [97], em cálculos sobre integrais duplas e infinitas [98] e em cálculo de integrais múltiplas [99]. Resumindo, de acordo com Navas (2013, p.22) esta função ‘tem aplicações variando da teoria dos números à Física’ e ‘é frequentemente utilizada para obter novas identidades’ [100].

Neste apêndice vamos tratar da série da função $G(\epsilon, \kappa, \xi)$ definida pela Eq. (4.41). Para acelerar a convergência da série truncada, é utilizada uma aproximação do erro de

truncamento. Essa aproximação é expressa em termos da função zeta de Lerch.

F.1 Funções de Lerch

A zeta de Lerch é uma função complexa de três argumentos [101], cujos valores são dados pela série

$$L(\xi, s, \kappa) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{2\pi i \xi n}}{(n + \kappa)^s}, \quad (\text{F.1})$$

em que ξ e κ são reais, enquanto s pode ser complexo. As restrições adotadas aqui para os argumentos são $\kappa \notin \mathbb{Z}_-$ e $\text{Re}(s) > 1$. A série tem como casos especiais outras funções importantes da Matemática, tais como a função zeta de Riemann, que é dada por [98,101],

$$\zeta(s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+1)^s} = L(0, s, 1), \quad (\text{F.2})$$

para $\text{Re}(s) > 1$, e a função zeta de Hurwitz, que é dada por

$$\zeta(s, \kappa) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\kappa + n)^s} = L(0, s, \kappa), \quad (\text{F.3})$$

para $\text{Re}(s) > 1$ e $\kappa \in \mathbb{C} - \mathbb{Z}_-$.

Na Figura F.1 são apresentados valores da zeta de Lerch como função do argumento ξ , com $\kappa = 0.5$, para três valores de s . De acordo com a Eq. (F.1), a zeta de Lerch é uma função periódica de ξ , com período 1. A parte real é simétrica em relação a $\xi = 0.5$, enquanto a imaginária é antissimétrica.

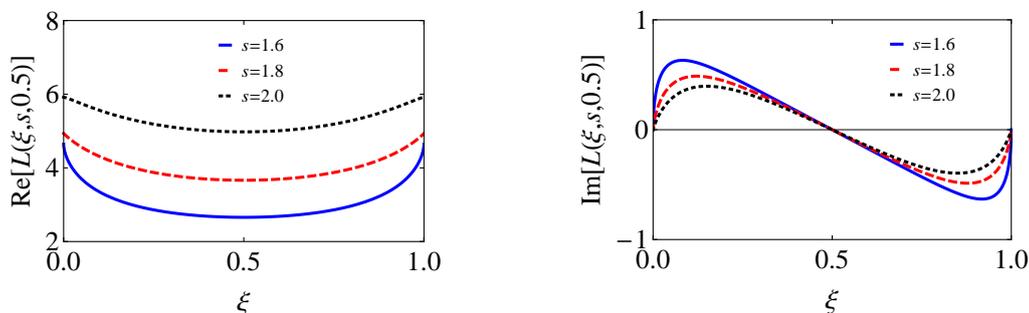


Figura F.1: (a) Parte real e (b) parte imaginária da zeta de Lerch como função de primeiro argumento, ξ , com $\kappa = 0.5$, para três valores de s .

Atualmente, os cálculos numéricos envolvendo a função zeta de Lerch podem ser feitos mediante o software *Mathematica* [73]. Ele disponibiliza o comando `Lerch[]`, que refere-se

à função transcendente de Lerch, dada pela série

$$\Phi(z, s, \kappa) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{(n + \kappa)^s}, \quad (\text{F.4})$$

para z, s e $\kappa \in \mathbb{C}$ [98, 101]. O caso $|z| = 1$ reduz-se à zeta de Lerch. Se $|z| > 1$, então a série diverge e, quando $|z| < 1$, a série converge, independentemente do valor de s . Em termos desta nova função, a função zeta de Lerch é o caso particular

$$L(\xi, s, \kappa) = \Phi(e^{2\pi i \xi}, s, \kappa). \quad (\text{F.5})$$

F.2 Aplicação da função zeta de Lerch

Como parte do desenvolvimento do Capítulo 4, surgiu a necessidade de avaliar numericamente a série bi-infinita dada pela Eq. (4.41), ou seja, escrevendo s em lugar de α ,

$$G^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{2\pi i(\kappa+n)\xi}}{\epsilon - |\kappa + n|^s}, \quad (\text{F.6})$$

em que $s, \epsilon, \kappa, \xi \in \mathbb{R}$, com as restrições $s > 1$, e $\{n \in \mathbb{Z} : \epsilon = |\kappa + n|^s\} = \emptyset$.

Ao truncarmos a série da Eq. (4.41), tomando valores de n em $\mathbb{Z}_N = \{n \in \mathbb{Z} : -N \leq n \leq N\}$, com N suficientemente grande, obtivemos a função

$$G_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) = \sum_{\mathbb{Z}_N} \frac{e^{2\pi i(\kappa+n)\xi}}{\epsilon - |\kappa + n|^s}. \quad (\text{F.7})$$

Esta série truncada apresenta uma convergência muito lenta, como será ilustrado adiante.

Para obtermos uma aproximação da série que convirja mais rapidamente do que a série truncada, faremos uma estimativa do erro de truncamento. Para isso, utilizaremos a função zeta de Lerch. O erro de truncamento é dado por

$$\begin{aligned} E_N(\epsilon, \kappa, \xi) &= G_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) - G^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) \\ &= - \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{e^{2\pi i(\kappa+n)\xi}}{\epsilon - (n + \kappa)^s} - \sum_{n=-(N+1)}^{-\infty} \frac{e^{2\pi i(\kappa+n)\xi}}{\epsilon - (n + \kappa)^s} \\ &= g_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) + g_N^{(s)}(\epsilon, -\kappa, -\xi), \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

com

$$g_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) = - \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{e^{2\pi i(\kappa+n)\xi}}{\epsilon - (n+\kappa)^s} = \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{e^{2\pi i(\kappa+n)\xi}}{(n+\kappa)^s} \cdot \frac{1}{1 - \frac{\epsilon}{(n+\kappa)^s}}. \quad (\text{F.9})$$

A fração $\frac{1}{1 - \frac{\epsilon}{(n+\kappa)^s}}$ é a soma da série geométrica, cujo primeiro termo vale 1 e cuja razão é $q = \frac{\epsilon}{(n+\kappa)^s}$. Quando N é suficientemente grande, ou seja, $|\epsilon| < (\kappa + N + 1)^s$, a série geométrica é convergente. Isso permite reescrevermos a Eq. (F.9) como

$$\begin{aligned} g_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) &= \sum_{n=N+1}^{\infty} \left[\frac{e^{2\pi i(\kappa+n)\xi}}{(n+\kappa)^s} \cdot \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\epsilon}{(n+\kappa)^s} \right)^m \right] \\ &= \sum_{n=N+1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \epsilon^m \frac{e^{2\pi i(\kappa+n)\xi}}{(n+\kappa)^{s(m+1)}} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \epsilon^m e^{2\pi i(\kappa+N+1)\xi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(e^{2\pi i\xi})^n}{(n+\kappa+N+1)^{s(m+1)}} \\ &= e^{2\pi i(\kappa+N+1)\xi} \sum_{m=0}^{\infty} \epsilon^m L(\xi, s(m+1), \kappa+N+1), \end{aligned} \quad (\text{F.10})$$

onde L é a função zeta de Lerch apresentada na seção anterior.

O erro de truncamento é dado exatamente pelas Equações (F.8) e (F.10). Apesar da série na última linha da Eq. (F.10) ser difícil de avaliar exatamente, nota-se que ela converge muito rapidamente. Portanto, como estimativa do erro de truncamento temos

$$E_N(\epsilon, \kappa, \xi) \approx E_{N,M}(\epsilon, \kappa, \xi) = g_{N,M}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) + g_{N,M}^{(s)}(\epsilon, -\kappa, -\xi), \quad (\text{F.11})$$

em que

$$g_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) \approx g_{N,M}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) = e^{2\pi i(\kappa+N+1)\xi} \sum_{m=0}^M \epsilon^m L(\xi, s(m+1), \kappa+N+1). \quad (\text{F.12})$$

Na próxima seção, será mostrado que basta tomar $M = 2$ para atingir resultados muito satisfatórios. Em lugar de aproximar a série pela forma truncada $G_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$, que converge lentamente, usaremos a aproximação da forma

$$G_{N,M}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) = G_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi) + E_{N,M}(\epsilon, \kappa, \xi), \quad (\text{F.13})$$

que converge mais rapidamente. A sequência de valores de $G_{N,M}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$ é chamada de

série acelerada.

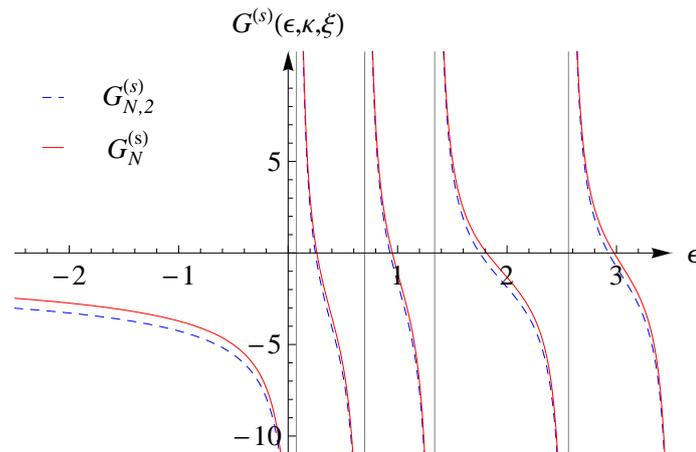


Figura F.2: Valores da série truncada, $G_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$, em linha contínua, e da série acelerada, $G_{N,2}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$, em linha tracejada, para $s = 1.6$, $\kappa = 0.2$ e $\xi = 0$, com $N = 20$. As linhas finas verticais são assíntotas.

É interessante analisar a série da Eq. (4.41) como função de ϵ . A Figura F.2 mostra os resultados para $s = 1.6$, $\kappa = 0.2$ e $\xi = 0$, obtidos mediante a série truncada $G_N^{(s)}$ e a série acelerada $G_{N,2}^{(s)}$, com $N = 20$. Há regiões em que as duas formas de aproximar a série diferem visivelmente. O mais importante é que em cálculos que utilizam esta série nesta tese, o erro não deve superar valores tão pequenos como 10^{-20} . Isto justifica o esforço aqui realizado para acelerar a convergência.

F.3 Testes de convergência

Nesta seção são apresentados, em tabelas e gráficos, os valores aproximados da série definida pela Eq. (4.41). Eles foram obtidos mediante os métodos apresentados na seção anterior. Será possível comparar as velocidades de convergência da série truncada e da série acelerada. Os cálculos e os gráficos foram desenvolvidos mediante o software *Mathematica* [73].

Na Tabela F.1 são mostrados os valores da série truncada, $G_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$, e os valores da série acelerada, $G_{N,M}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$, para $M = 2$. Os valores dos parâmetros são $s = 1.6$, $\epsilon = -0.3$, $\kappa = 0.2$, $\xi = 0$, e o índice de truncamento, N , toma valores do 0 ao 100 001. Observa-se que $G_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$ apresenta uma convergência extremamente lenta. De fato, em $N = 100\,000$ algumas das casas decimais mostradas apresentam variação. Diferentemente, $G_{N,2}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$ apresenta convergência para um valor próximo de -6.762766191 .

As primeiras nove casas decimais deixam de mudar a partir de $N = 20$.

Tabela F.1: Valores da série truncada, $G_N^{(s)}$, e da série acelerada, $G_{N,2}^{(s)}$, com os argumentos sendo $s = 1.6$, $\epsilon = -0.3$, $\kappa = 0.2$, $\xi = 0$.

N	$G_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$	$G_{N,2}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$
0	-2.658541048	-6.849236704
5	-5.571329725	-6.762767157
10	-5.951316969	-6.762766221
19	-6.202327531	-6.762766192
20	-6.218862128	-6.762766191
21	-6.234157613	-6.762766191
100	-6.553086690	-6.762766191
1000	-6.709952330	-6.762766191
\vdots	\vdots	\vdots
10000	-6.749496350	-6.762766191
99999	-6.759432847	-6.762766191
100000	-6.759432867	-6.762766191
100001	-6.759432887	-6.762766191

Na Figura F.3 são mostrados os valores da série truncada e da série acelerada, de modo que é possível comparar as suas velocidades de convergência. Nos cálculos toma-se $0 \leq N \leq 200$, com (a) $s = 1.6$, (b) $s = 1.8$ e (c) $s = 2.0$. O painel (a) mostra os comportamentos observados na Tabela F.1. Pode-se perceber que $G_{N,2}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$ converge rapidamente para um valor próximo de -6.762766191 . Tomando este valor como referência, é fácil compreender o quanto é lenta a convergência da $G_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$. Nota-se que os termos além de $N = 200$ terão uma contribuição de aproximadamente 0.14 para a soma. Nos painéis (b) e (c), as séries aceleradas convergem aproximadamente para -6.154672731 e -5.839424019 , respectivamente. Numa análise geral, a comparação dos três painéis permite concluir que, independentemente do valor de s , a função $G_{N,2}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$ mostra-se mais eficiente, por apresentar uma convergência muito mais rápida. Observa-se que, quanto menor o valor de s , mais lenta é a convergência da série truncada. Além disso, é possível verificar que a estimativa do erro de truncamento, $E_{N,2}^{(s)}$, tende a zero como $1/N^{s-1}$.

É importante ressaltar que a velocidade de convergência das séries aceleradas depende do índice M em que truncamos a série na Eq. (F.8). Nos resultados mostrados anteriormente, usamos $M = 2$. Para termos uma ideia da influência do valor de M , analisamos o caso $s = 1.6$, $\epsilon = -0.3$, $\kappa = 0.2$ e $\xi = 0$. Considerando nove casas decimais, a Tabela F.2 mostra os valores do índice N em que a série acelerada para de mudar para $M = 0, 1, \dots, 4$. Percebe-se que $M = 2$ produz resultados satisfatórios para um valor relativamente baixo

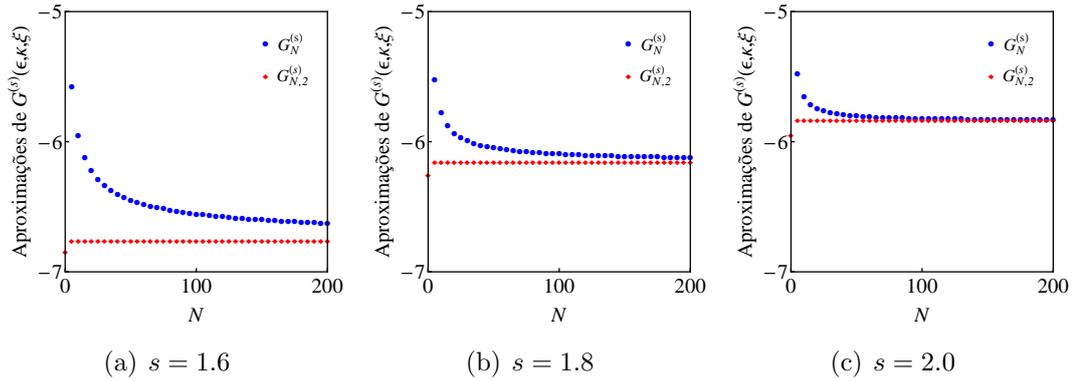


Figura F.3: Valores da série truncada, $G_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$, e da série acelerada, $G_{N,2}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$, para (a) $s = 1.6$, (b) $s = 1.8$ e (c) $s = 2$. O índice de truncamento, N , varia de 0 a 200 com passo 5.

do índice N de truncamento. Mudando o valor de s , nossos testes numéricos indicam que o valor absoluto do erro da série acelerada $G_{N,M}^{(s)}(\epsilon, \kappa, 0)$ decai como $1/N^{(M+2)s-1}$.

Tabela F.2: Valor de M , índice N_9 em que as primeiras nove casas decimais de $G_{N,M}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$ deixam de variar e lei de decaimento do valor absoluto do erro da série acelerada.

M	0	1	2	3	4
N_9	6911	275	20	14	5
$ G_{N,M}^{(s)} - G_N^{(s)} $	$N^{-2.2}$	$N^{-3.8}$	$N^{-5.4}$	$N^{-7.0}$	$N^{-8.6}$

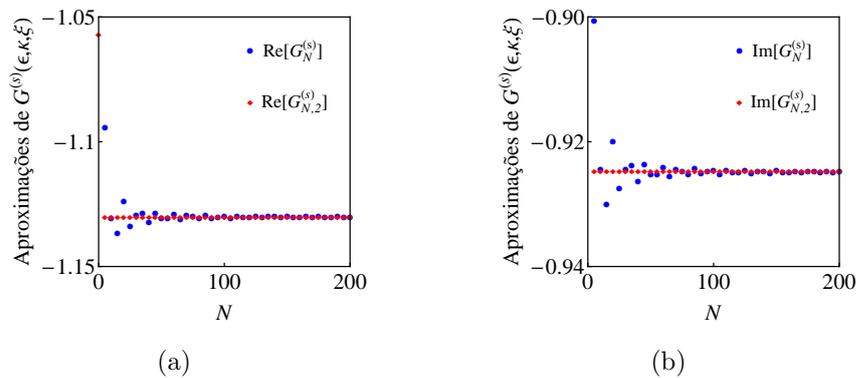


Figura F.4: (a) Parte real e (b) parte imaginária da série truncada, $G_N^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$, e da série acelerada, $G_{N,2}^{(s)}(\epsilon, \kappa, \xi)$, para $s = 1.6$, $\epsilon = -0.3$, $\kappa = 0.2$ e $\xi = \pi/6$. O índice de truncamento, N , varia de 0 a 200 com passo 5.

O teste de convergência foi realizado para diferentes valores não nulos de ξ . A Figura F.4 mostra os resultados para $s = 1.6$, $\epsilon = -0.3$, $\kappa = 0.2$ e $\xi = \pi/6$. Como esperado, a série acelerada converge mais rapidamente que a série truncada. No entanto, diferentemente do caso $\xi = 0$, a série truncada oscila e parece convergir menos lentamente que na

Figura F.3(a). De fato, é possível verificar que a estimativa do valor absoluto do erro de truncamento, $|E_{N,2}^{(s)}|$, tem como cota superior $1/N^s$.

F.4 Conclusões sobre a aceleração de convergência

Foi aplicada a função zeta de Lerch para acelerar a convergência de uma série que tem grande importância nos desenvolvimentos do Capítulo 4. Através das tabelas e gráficos apresentados pode-se concluir que a série sob investigação converge lentamente para valores do expoente s menores que 2. Foi visto que graças à aceleração da convergência, pode-se trabalhar satisfatoriamente com uma quantidade relativamente pequena de termos.

Apêndice G

Soma exata da série $G(\epsilon, \kappa, \xi)$ para o caso inteiro

No caso inteiro, $\alpha = 2$, a série da Eq. (4.41) é dada por

$$\begin{aligned} G(\epsilon, \kappa, \xi) &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{2\pi i(n+\kappa)\xi}}{\epsilon - (\kappa + n)^2} \\ &= \frac{\pi e^{2\pi i\kappa[\xi]} (\text{sen}[2\pi\sqrt{\epsilon}(1 + [\xi] - \xi)] + e^{2\pi i\kappa} \text{sen}[2\pi\sqrt{\epsilon}(\xi - [\xi])])}{\sqrt{\epsilon} (\cos(2\pi\kappa) - \cos(2\pi\sqrt{\epsilon}))}, \end{aligned} \quad (\text{G.1})$$

em que $[\xi]$ é a parte inteira de ξ . Como resultado, a série da Eq. (4.31) torna-se

$$G(\epsilon, \kappa) = G(\epsilon, \kappa, 0) = \frac{\pi \text{sen}(2\pi\sqrt{\epsilon})}{\sqrt{\epsilon} (\cos(2\pi\kappa) - \cos(2\pi\sqrt{\epsilon}))}. \quad (\text{G.2})$$

Então, a Eq. (4.30) pode ser escrita como

$$\cos(2\pi\kappa) = f(\epsilon), \quad (\text{G.3})$$

onde

$$f(\epsilon) = \cos(2\pi\sqrt{\epsilon}) + \frac{\pi v \text{sen}(2\pi\sqrt{\epsilon})}{\sqrt{\epsilon}}. \quad (\text{G.4})$$

Ao tomar $\sqrt{\epsilon} = i\sqrt{|\epsilon|}$ quando $\epsilon < 0$, esta função é suave sobre a linha real e satisfaz $\lim_{\epsilon \rightarrow -\infty} f(\epsilon) = +\infty$. Como ϵ cresce, $f(\epsilon)$ primeiro cai para um valor abaixo de -1 , então, ele alcança um valor acima de $+1$, e continua a oscilar dessa maneira (ver Figura. G.1). De acordo com a Eq. (G.3), as bandas de energia são dadas pelos intervalos onde $|f(\epsilon)| \leq 1$. Eles estão separados pelos *gaps* e podem ser rotulados pelo número inteiro não negativo

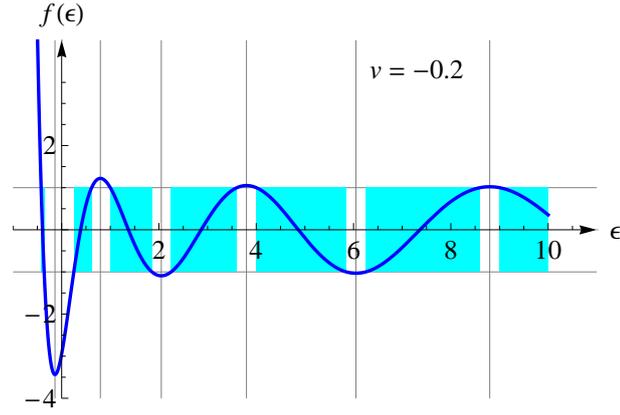


Figura G.1: A função $f(\epsilon)$ dada pela Eq. (G.4) para $v = -0.2$. As alturas das linhas horizontais são -1 e $+1$. As energias das regiões sombreadas correspondem às bandas. As linhas verticais são dadas por $f'(\epsilon) = 0$.

j . O coeficiente do decaimento exponencial, h_j , da função de Wannier da banda de índice j foi dado por Kohn [10]. O j -ésimo *gap* contém um valor de energia, denotado como $\tilde{\epsilon}_j$, onde $f'(\epsilon)$ se anula. Isso leva aos números $\tilde{h}_j = \text{arccosh}(f(\tilde{\epsilon}_j))$. Então,

$$h_j = \begin{cases} \tilde{h}_0, & \text{if } j = 0, \\ \min(\tilde{h}_{j-1}, \tilde{h}_j), & \text{if } j > 0. \end{cases} \quad (\text{G.5})$$

Quando $v = -0.2$, obtemos $h_0 \approx 1.90593$, $h_1 \approx 0.652593$ e $h_2 \approx 0.425581$.

Apêndice H

Demonstrações auxiliares

Neste apêndice apresentam-se algumas demonstrações breves que ajudam a fundamentar os resultados desta tese.

H.1 Ortonormalização das funções de Bloch

Nesta seção, demonstra-se a propriedade da função de Bloch, mencionada no Capítulo 2, nomeada de condição de ortonormalização.

Para auxiliar nos cálculos utiliza-se a seguinte fórmula,

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{ikna} = \frac{2\pi}{a} \delta(k), \quad (\text{H.1})$$

válida para $-2\pi/a < k < 2\pi/a$, como demonstrado por Nacbar [50]. A integral do produto de duas funções de Bloch quaisquer é dada por

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{j,k}^*(x) \psi_{j',k'}(x) dx &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{na}^{(n+1)a} \psi_{j,k}^*(x) \psi_{j',k'}(x) dx \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_0^a \psi_{j,k}^*(\xi + na) \psi_{j',k'}(\xi + na) d\xi \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_0^a e^{-ikna} \psi_{j,k}^*(\xi) e^{ik'na} \psi_{j',k'}(\xi) d\xi \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-ikna} e^{ik'na} \int_0^a \psi_{j,k}^*(\xi) \psi_{j',k'}(\xi) d\xi \\ &= \delta_{j,j'} \frac{2\pi}{a} \delta(k' - k), \end{aligned}$$

desde que

$$\int_0^a |\psi_{j,k}(x)| dx = 1. \quad (\text{H.2})$$

H.2 Existência da função de Bloch

No Capítulo 2 afirmamos que o teorema de Bloch poderá ser usado para o caso fracionário. Nesta seção apresentamos a demonstração de que o operador hamiltoniano comuta com o operador de translação. Primeiramente temos que

$$\begin{aligned} \hat{T}\hat{H}\psi(x) &= \hat{T}(-C_\alpha D^\alpha \psi(x) + V(x)\psi(x)) \\ &= \hat{T}\left(\frac{C_\alpha}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\alpha e^{ikx} \phi(k) dk + V(x)\psi(x)\right) \\ &= -C_\alpha \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\alpha e^{ik(x+a)} \phi(k) dk + V(x+a)\psi(x+a). \end{aligned}$$

Como o potencial é periódico, $V(x+a) = V(x)$, tem-se

$$\begin{aligned} \hat{T}\hat{H}\psi(x) &= -C_\alpha \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\alpha e^{ikx} e^{ika} \phi(k) dk + V(x)\psi(x+a) \\ &= -C_\alpha \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\alpha e^{ikx} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik(x-a)} \psi(x) dx dk + V(x)\psi(x+a) \\ &= -C_\alpha \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\alpha e^{ikx} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \psi(x+a) dx dk + V(x)\psi(x+a) \\ &= -C_\alpha \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\alpha e^{ikx} \mathcal{F}(\psi(x+a)) dk + V(x)\psi(x+a) \\ &= [-C_\alpha D^\alpha + V(x)]\psi(x+a) \\ &= \hat{H}\hat{T}\psi(x). \end{aligned}$$

Da comutatividade dos operadores segue a existência das funções de Bloch, ou seja, dos autovetores comuns de ambos operadores [7]. Isto garante a utilização das funções de Bloch e seus teoremas para a ordem fracionária.

H.3 Ortonormalização das funções de Wannier

Como mencionado no Capítulo 2 as funções de Wannier formam um conjunto ortonormal. Segue a demonstração:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} w_{j,n}^*(x)w_{j',n'}(x)dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} e^{+ikna} \psi_{j,k}^* dk \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} e^{-ik'n'a} \psi_{j',k'} dk' \right) dx \\
 &= \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} e^{ia(kn-k'n')} dk' dk \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{j,k}^*(x) \psi_{j',k'}(x) dx \\
 &= \frac{a}{2\pi} \delta_{j,j'} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} e^{ia(kn-k'n')} \delta(k' - k) dk' dk \\
 &= \frac{a}{2\pi} \delta_{j,j'} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} e^{iak(n-n')} dk \\
 &= \delta_{j,j'} \delta_{n,n'}.
 \end{aligned}$$

H.4 Equivalência entre duas definições da derivada de Riesz

Como mencionado no Capítulo 2, a Eq. (2.20) produz os mesmos resultados que a definição usada na Ref. [27], que é dada por:

$$D_{RZ}^\alpha \psi(x) = \Gamma(1 + \alpha) \frac{\text{sen}(\pi\alpha/2)}{\pi} \int_0^\infty \frac{\psi(x + \xi) - 2\psi(x) + \psi(x - \xi)}{\xi^{\alpha+1}} d\xi, \quad (\text{H.3})$$

para $0 < \alpha < 2$. Nesta seção iremos demonstrar a equivalência entre as definições, saindo da Eq. (2.20) e chegando na Eq. (H.3).

A fim de simplificar os cálculos, usaremos a fórmula 3.712.2 da Ref. [74]:

$$\int_0^\infty \cos(ax^p) dx = \frac{\Gamma(1 + \frac{1}{p}) \cos(\frac{\pi}{2p})}{a^{1/p}}, \quad a > 0 \text{ e } p > 1. \quad (\text{H.4})$$

Com a ajuda desta, temos

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\int_0^\infty \cos(ax^p) dx}_{\text{Substituindo } x = \xi^{\frac{1}{p}} \text{ e } dx = \frac{1}{p} \xi^{\frac{1}{p}-1} d\xi} &= \underbrace{\frac{1}{p} \int_0^\infty \cos(a\xi) \xi^{\frac{1}{p}-1} d\xi}_{\text{Substituindo } \beta = \frac{1}{p} - 1 \rightarrow p = \frac{1}{\beta+1}} \\
 &= (1 + \beta) \int_0^\infty \xi^\beta \cos(a\xi) d\xi = \frac{\Gamma(\beta + 2) \cos(\frac{\pi}{2}(\beta + 1))}{a^{\beta+1}},
 \end{aligned}$$

logo

$$\int_0^{\infty} \xi^{\beta} \cos(a\xi) d\xi = -\frac{\Gamma(\beta + 1) \operatorname{sen}\left(\frac{\pi\beta}{2}\right)}{a^{\beta+1}}, \quad -1 < \beta < 0. \quad (\text{H.5})$$

A demonstração exige o uso de alguns resultados apresentados nos apêndices, como as Eqs. (A.5) e (A.6), além da propriedade (2.31) apresentada no Capítulo 2. Adotamos como condição de validade as seguintes equações

$$\mathbf{CV} = \begin{cases} \xi^{1-\alpha} [\psi'(x + \xi) - \psi'(x - \xi)] \Big|_{\xi \rightarrow 0}^{\xi \rightarrow \infty} = 0 & \text{como CV}_1 \\ ([\xi^{-\alpha} [\psi(x + \xi) + \psi(x - \xi) - 2\psi(x)]] \Big|_{\xi \rightarrow 0}^{\xi \rightarrow \infty} = 0 & \text{como CV}_2. \end{cases}$$

Dessa forma, pela propriedade (2.31) tem-se

$$\begin{aligned} D^{\alpha}\psi(x) &= -D^{\alpha-2}\psi''(x) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^{\alpha-2} e^{ikx} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx'} \psi''(x') dx' dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} |k|^{\alpha-2} e^{ik(x-x')} dk \right] \psi''(x') dx' \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[2 \int_0^{+\infty} k^{\alpha-2} \cos(|x-x'|k) dk \right] \psi''(x') dx'. \end{aligned} \quad (\text{H.6})$$

Utilizando a Eq.(H.5), obtemos

$$\begin{aligned} D^{\alpha}\psi(x) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{-\Gamma(\alpha-1) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2} - \pi\right)}{|x-x'|^{\alpha-1}} \right] \psi''(x') dx' \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\Gamma(\alpha-1) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}{|x-x'|^{\alpha-1}} \right] \psi''(x') dx'. \end{aligned} \quad (\text{H.7})$$

Colocando em evidência as constantes,

$$\begin{aligned}
D^\alpha \psi(x) &= \frac{\Gamma(\alpha - 1) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi''(x')}{|x - x'|^{\alpha-1}} dx' \\
&= \frac{\Gamma(\alpha - 1) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}{\pi} \left[\underbrace{\int_{-\infty}^x \frac{\psi''(x')}{(x - x')^{\alpha-1}} dx'}_{\text{Substituindo } \xi = x - x' \text{ e } dx' = -d\xi} + \underbrace{\int_x^{+\infty} \frac{\psi''(x')}{(x' - x)^{\alpha-1}} dx'}_{\text{Substituindo } \xi = x' - x \text{ e } dx' = d\xi} \right] \\
&= \frac{\Gamma(\alpha - 1) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}{\pi} \left[\int_0^\infty \frac{\psi''(x - \xi)}{\xi^{\alpha-1}} d\xi + \int_0^{+\infty} \frac{\psi''(x + \xi)}{\xi^{\alpha-1}} d\xi \right] \\
&= \frac{\Gamma(\alpha - 1) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\psi''(x + \xi) + \psi''(x - \xi)}{\xi^{\alpha-1}} d\xi.
\end{aligned}$$

Para resolver a integral, faz-se a seguinte substituição de variáveis: $u = \xi^{1-\alpha} \Rightarrow du = (1 - \alpha)\xi^{-\alpha}d\xi$ e $dv = [\psi''(x + \xi) + \psi''(x - \xi)]d\xi \Leftarrow v = \psi'(x + \xi) + \psi'(x - \xi)$, ou seja,

$$\begin{aligned}
D^\alpha \psi(x) &= \frac{\Gamma(\alpha - 1) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}{\pi} \left[\underbrace{\xi^{1-\alpha} [\psi'(x + \xi) - \psi'(x - \xi)]}_{\text{CV}_1} \Big|_{\xi \rightarrow 0}^{\xi \rightarrow \infty} \right. \\
&\quad \left. - (1 - \alpha) \int_0^{+\infty} [\psi'(x + \xi) - \psi'(x - \xi)] \xi^{-\alpha} d\xi \right] \\
&= \frac{\Gamma(\alpha) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}{\pi} \int_0^{+\infty} [\psi'(x + \xi) - \psi'(x - \xi)] \xi^{-\alpha} d\xi. \quad (\text{H.8})
\end{aligned}$$

Agora convém fazer a substituição de variáveis: $u = \xi^{-\alpha} \Rightarrow du = -\alpha\xi^{-(\alpha+1)}d\xi$ e $dv = [\psi'(x + \xi) - \psi'(x - \xi)]d\xi \Leftarrow v = \psi(x + \xi) + \psi(x - \xi) - 2\psi(x)$. Logo,

$$\begin{aligned}
D^\alpha \psi(x) &= \frac{\Gamma(\alpha) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}{\pi} \left[\underbrace{[\xi^{-\alpha} [\psi(x + \xi) + \psi(x - \xi) - 2\psi(x)]]}_{\text{CV}_2} \Big|_{\xi \rightarrow 0}^{\xi \rightarrow \infty} \right. \\
&\quad \left. + \alpha \int_0^{+\infty} \frac{\psi(x + \xi) + \psi(x - \xi) - 2\psi(x)}{\xi^{\alpha+1}} d\xi \right] \\
&= \frac{\Gamma(\alpha + 1) \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\psi(x + \xi) + \psi(x - \xi) - 2\psi(x)}{\xi^{\alpha+1}} d\xi \\
&= D_{RZ}^\alpha \psi(x). \quad (\text{H.9})
\end{aligned}$$

H.5 Propriedades da derivada de Riesz

Adotando $f(x)$ e $g(x)$ como funções deriváveis segundo Riesz e considerando c e s como constantes, demonstra-se as propriedades da derivada de Riesz apresentadas no Capítulo 2:

- **Transformada de Fourier**

Aplicando a transformada de Fourier em ambos os lados da Eq. (2.23), temos que

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(D^\alpha \psi(x)) &= \mathcal{F}(-\mathcal{F}^{-1}(|k|^\alpha \mathcal{F}(\psi(x)))) \\ &= -|k|^\alpha \mathcal{F}(\psi(x)).\end{aligned}$$

- **Linearidade**

$$\begin{aligned}D^\alpha [cf(x) + sg(x)] &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik'x} |k'|^\alpha dk' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik'x} [cf(x) + sg(x)] dx \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik'x} |k'|^\alpha dk' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik'x} cf(x) dx \\ &\quad - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik'x} |k'|^\alpha dk' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik'x} sg(x) dx \\ &= c \left(-\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik'x} |k'|^\alpha dk' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik'x} f(x) dx \right) \\ &\quad + s \left(-\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik'x} |k'|^\alpha dk' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik'x} g(x) dx \right) \\ &= cD^\alpha f(x) + sD^\alpha g(x).\end{aligned}$$

- **Derivada da exponencial**

Adotando $\psi(x) = e^{ikx}$, temos que

$$\phi(k') = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik'x} e^{ikx} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(k'-k)x} dx \underbrace{=}_{\text{Eq.(C.8)}} 2\pi\delta(k' - k).$$

Com isso, a derivada da exponencial é

$$D^\alpha e^{ikx} = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik'x} |k'|^\alpha 2\pi\delta(k' - k) dk' \underbrace{=}_{\text{Eq.(C.3)}} -|k|^\alpha e^{ikx}.$$

- **Derivada de uma constante**

Adotando $k = 0$, na demonstração da derivada da exponencial, temos que a derivada de uma constante é

$$D^\alpha 1 = D^\alpha e^{i0x} = -|0|^\alpha e^{i0x} = -|0|^\alpha 1 = 0. \quad (\text{H.10})$$

Pela linearidade, temos que

$$D^\alpha(c) = D^\alpha(1 \cdot c) = c D^\alpha 1 = c \cdot 0 = 0. \quad (\text{H.11})$$

- **Derivada do seno**

Utilizando os resultados da derivada da exponencial e a linearidade da derivada de Riesz, temos que

$$\begin{aligned} D^\alpha \operatorname{sen}(kx) &= D^\alpha \left(\frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i} \right) \\ &= \frac{1}{2i} (D^\alpha e^{ikx}) - \frac{1}{2i} (D^\alpha e^{-ikx}) \\ &= -\frac{|k|^\alpha}{2i} e^{ikx} + \frac{|k|^\alpha}{2i} e^{-ikx} \\ &= -|k|^\alpha \left(\frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i} \right) \\ &= -|k|^\alpha \operatorname{sen}(kx). \end{aligned}$$

- **Derivada do cosseno**

Similar à derivada do seno, utilizaremos os resultados da derivada da exponencial e da linearidade da derivada de Riesz:

$$\begin{aligned} D^\alpha \operatorname{cos}(kx) &= D^\alpha \left(\frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2} (D^\alpha e^{ikx}) + \frac{1}{2} (D^\alpha e^{-ikx}) \\ &= -\frac{|k|^\alpha}{2} e^{ikx} - \frac{|k|^\alpha}{2} e^{-ikx} \\ &= -|k|^\alpha \left(\frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} \right) \\ &= -|k|^\alpha \operatorname{cos}(kx). \end{aligned}$$

- **Lei dos expoentes**

Utilizando o resultado da transformada da derivada segunda, na Eq. (A.6), temos

$$\begin{aligned}
 D^\alpha D^2 \psi(x) &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik'x} |k'|^\alpha \phi''(k') dk' \\
 &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} -e^{ik'x} |k'|^\alpha k'^2 \phi(k') dk' \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik'x} |k'|^{\alpha+2} \phi(k') dk' \\
 &= -D^{\alpha+2} \psi(x).
 \end{aligned}$$

• **Operação inversa da integral**

Sendo

$$D^\alpha F(x) = f(x) \quad (\text{H.12})$$

é natural definir a integral fracionária de Riesz por

$$I^\alpha f(x) = F(x). \quad (\text{H.13})$$

Consideremos que as transformadas de Fourier das funções $f(x)$ e $F(x)$ são $\phi(k)$ e $\Phi(k)$, respectivamente, isto é,

$$\phi(k) = \mathcal{F}(f(x)) \quad (\text{H.14})$$

e

$$\Phi(k) = \mathcal{F}(F(x)). \quad (\text{H.15})$$

Isto equivale a

$$f(x) = \mathcal{F}^{-1}(\phi(k)) \quad (\text{H.16})$$

e

$$F(x) = \mathcal{F}^{-1}(\Phi(k)). \quad (\text{H.17})$$

Pela propriedade na Eq. (2.25), temos que

$$\phi(k) = \mathcal{F}(D^\alpha F(x)) = -|k|^\alpha \mathcal{F}(F(x)) = -|k|^\alpha \Phi(k). \quad (\text{H.18})$$

Além disso, de acordo com a Eq. (2.23) e substituindo as Eq. (H.14), (H.18), (H.17) e

(H.13) temos que

$$\begin{aligned}
D^{-\alpha}f(x) &= -\mathcal{F}^{-1}(|k|^{-\alpha}\mathcal{F}(f(x))) = -\mathcal{F}^{-1}(|k|^{-\alpha}\phi(k)) \\
&= \mathcal{F}^{-1}(|k|^{-\alpha}|k|^{\alpha}\Phi(k)) = \mathcal{F}^{-1}(\Phi(k)) = F(x) \\
&= I^{\alpha}f(x).
\end{aligned} \tag{H.19}$$

H.6 Limite de $G(\epsilon(\kappa), \kappa, \xi)$ quando $\epsilon \rightarrow -\infty$

A função $G(\epsilon, \kappa)$ definida na Eq. (4.31) do Capítulo 4 é dada por

$$G(\epsilon, \kappa) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{\epsilon - |\kappa + n|^{\alpha}}. \tag{H.20}$$

Esta série tem a propriedade (4.37) dada por

$$\lim_{\epsilon \rightarrow -\infty} G(\epsilon, \kappa) = 0. \tag{H.21}$$

Demonstração:

Como $G(\epsilon, \kappa)$ é periódica em κ com período 1, a análise pode ser restrita a $\kappa \in [-1/2, 1/2]$. Considerando $\epsilon < 0$, vale $\epsilon = -|\epsilon|$ e temos

$$0 < -G(\epsilon, \kappa) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{|\epsilon| + |\kappa + n|^{\alpha}} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} f(n), \tag{H.22}$$

em que

$$f(n) = \frac{1}{|\epsilon| + |\kappa + n|^{\alpha}}. \tag{H.23}$$

Quando $-1/2 \leq \kappa \leq 1/2$, esta função cresce para $n \in (-\infty, 0]$ e decresce para $n \in [0, +\infty)$.

É conveniente notar que,

$$\begin{aligned}
\sum_{n \in \mathbb{Z}} f(n) &= f(0) + \sum_{n=1}^{+\infty} f(n) + \sum_{n=-1}^{-\infty} f(n) \\
&\leq f(0) + \int_0^{+\infty} f(n) dn + \int_0^{-\infty} f(n) dn \\
&= f(0) + \int_{-\infty}^{+\infty} f(n) dn \\
&= f(0) + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dn}{|\epsilon| + |\kappa + n|^\alpha}. \tag{H.24}
\end{aligned}$$

Fazendo a mudança de variável $x = \kappa + n \Rightarrow dx = dn$, e os limites de integração permanecem os mesmos. Logo, obtemos

$$0 < -G(\epsilon, \kappa) \leq f(0) + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{|\epsilon| + |x|^\alpha} = f(0) + 2 \int_0^{+\infty} \frac{dx}{|\epsilon| + |x|^\alpha}, \tag{H.25}$$

e, portanto,

$$0 < -G(\epsilon, \kappa) < \frac{1}{|\epsilon| + |\kappa|^\alpha} + \frac{2}{|\epsilon|^{1-\frac{1}{\alpha}}} \int_0^{+\infty} \frac{dt}{1 + t^\alpha}. \tag{H.26}$$

Como $1 < \alpha \leq 2$, a integral do lado direito converge e esse lado tende a zero quando $\epsilon \rightarrow -\infty$. E, como $-G(\epsilon, \kappa)$ está entre funções que tendem a zero quando $\epsilon \rightarrow -\infty$, conclui-se que $-G(\epsilon, \kappa) \rightarrow 0$, ou seja, $G(\epsilon, \kappa) \rightarrow 0$.

H.7 Possíveis simetrias das funções de Bloch

No Capítulo 4 é apresentada uma breve explicação sobre as simetrias das funções de Bloch. Nesta seção é relacionada a anulação de $S(\kappa)$ com as simetrias das funções de Bloch.

A forma das funções de Bloch foram divididas em dois casos.

No primeiro caso, a função de Bloch é dada pela Eq. (4.40), isto é

$$\chi_\kappa(\xi) = S(\kappa) \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{2\pi i(\kappa+n)\xi}}{\epsilon(\kappa) - |\kappa + n|^\alpha}.$$

No ponto Γ , ou seja, para $\kappa = 0$, temos

$$\chi_0(\xi) = S(0) \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{2\pi i n \xi}}{\epsilon(0) - |n|^\alpha} = S(0) \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{\cos(2\pi n \xi)}{\epsilon(0) - |n|^\alpha}. \tag{H.27}$$

Portanto, a função de Bloch é simétrica em relação a $\xi = 0$. Isto implica que ela é do tipo Γ_1 . No ponto X , ou seja, para $\kappa = 1/2$, temos

$$\begin{aligned}
 \chi_{1/2}(\xi) &= S(1/2) \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{2\pi i(n+1/2)\xi}}{\epsilon(1/2) - |n + 1/2|^\alpha} \\
 &= S(1/2) \sum_{n \in \mathbb{Z}+1/2} \frac{e^{2\pi i(n+1/2)\xi}}{\epsilon(1/2) - |n + |^\alpha} \\
 &= S(1/2) \sum_{n \in \mathbb{Z}+1/2} \frac{\cos(2\pi n\xi)}{\epsilon(1/2) - |n + |^\alpha}. \tag{H.28}
 \end{aligned}$$

Portanto, a função de Bloch é simétrica em relação a $\xi = 0$. Conclui-se que ela é do tipo X_1 .

No segundo caso, $\chi(\xi) = 2i c_{n'} \text{sen}(\pi\mu\xi)$. Portanto, vale

$$\begin{aligned}
 \chi(-\xi) &= 2i c_{n'} \text{sen}(-\pi\mu\xi) \\
 &= -2i c_{n'} \text{sen}(\pi\mu\xi) \\
 &= -\chi(\xi). \tag{H.29}
 \end{aligned}$$

Conclui-se que a função de Bloch é antissimétrica em $\xi = 0$. Então, neste caso, a função de Bloch pode ser Γ_2 ou X_2 .

Em resumo, quando a função de Bloch for do caso 1, será X_1 ou Γ_1 . Se for do caso 2, será X_2 ou Γ_2 .

Apêndice I

Comportamento assintótico das funções de Wannier

Um esboço do raciocínio envolvendo as Eqs. (4.100) e (4.102) é discutido aqui. Primeiro, deve-se notar que

$$\omega_j(\xi + n) = \int_{-1/2}^{1/2} e^{2\pi i n \kappa} \chi_{j,\kappa}(\xi) d\kappa. \quad (\text{I.1})$$

A integral ao longo do intervalo $[-1/2, 1/2]$ pode ser calculada ao longo de um caminho composto no plano complexo. Para fazer isso, a função de Bloch é estendida ao plano complexo κ . Sendo consistente com as condições sobre a linha real, a extensão é tal que $\chi_{j,\kappa+1}(\xi) = \chi_{j,\kappa}(\xi)$ e $\chi_{j,\kappa}(\xi) = \chi_{j,-\kappa}^*(\xi)$. Para $n > 0$, o caminho composto consiste em duas linhas poligonais C e $-C^*$, cujos parâmetros δ e b são números reais positivos (δ será desprezível). À direita do eixo imaginário κ , o contorno C começa em $\kappa = 0$, e vai para $\kappa = \delta + i\delta$, segue uma linha vertical até $\kappa = \delta + ib$, continua ao longo de uma linha horizontal para alcançar $\kappa = 1/2 + ib$ e desce ao longo de uma linha reta vertical, para terminar em $\kappa = 1/2$. O parâmetro b é escolhido para garantir que $\chi_{j,\kappa}$ é analítica entre C e o eixo real κ . À esquerda do eixo imaginário κ , o contorno $-C^*$ é obtido pela transformação C de acordo com $\kappa \rightarrow -\kappa^*$. Além disso, $-C^*$ vai de $\kappa = -1/2$ para $\kappa = 0$. Nestas condições, tem-se

$$\omega_j(\xi + n) = \int_C e^{2\pi i n \kappa} \chi_{j,\kappa}(\xi) d\kappa + \int_{-C^*} e^{2\pi i n \kappa} \chi_{j,\kappa}(\xi) d\kappa. \quad (\text{I.2})$$

Os caminhos verticais em $\kappa = -1/2$ e $\kappa = 1/2$ cancelam-se entre si. Como $\delta \rightarrow 0$,

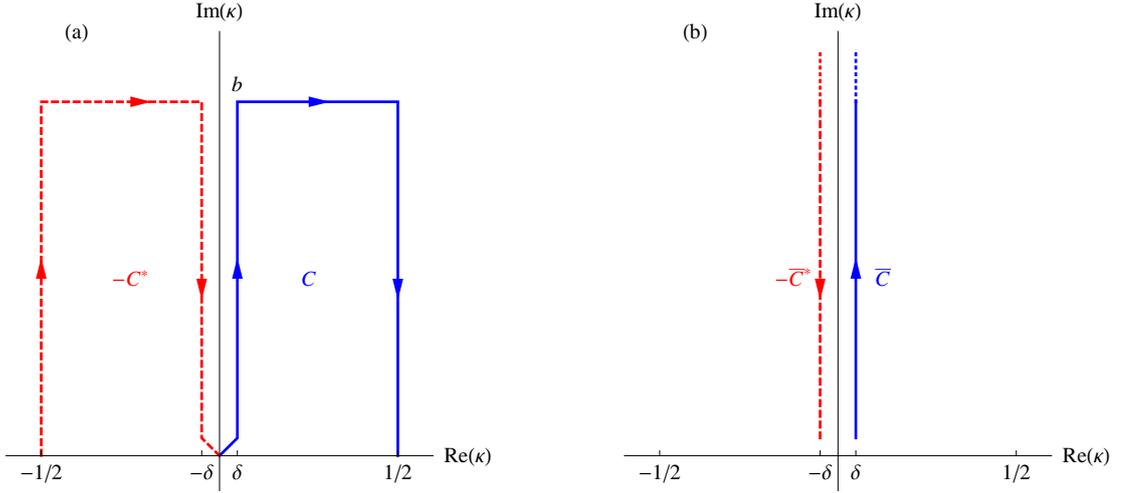


Figura I.1: (a) Os caminhos C e $-C^*$ para uma integração alternativa, no cálculo de $\omega_j(\xi + n)$. (b) Os caminhos simplificados \bar{C} e $-\bar{C}^*$.

os dos caminhos de $\kappa = -\delta + i\delta$ para $\kappa = 0$, e $\kappa = 0$ para $\kappa = \delta + i\delta$ vão se anular. Além disso, como $\text{Im}(\kappa) > 0$ e $n > 0$, o decaimento exponencial diminui fortemente quando $\text{Im}(\kappa)$ cresce. Então, os caminhos horizontais fornecem contribuições desprezíveis e as integrais são dominadas pelos caminhos verticais em $\kappa = \pm\delta$. Os resultados serão essencialmente os mesmos ao fazer $b \rightarrow +\infty$, e os caminhos serão denotados como \bar{C} e $-\bar{C}^*$. Alterando a variável no segundo termo, tem-se

$$\begin{aligned} \omega_j(\xi + n) &\approx \int_{\bar{C}} e^{2\pi i n \kappa} \chi_{j,\kappa}(\xi) d\kappa + \int_{-\bar{C}^*} e^{2\pi i n \kappa} \chi_{j,\kappa}(\xi) d\kappa \\ &\approx \int_{\bar{C}} [e^{2\pi i n \kappa} \chi_{j,\kappa}(\xi) - e^{-2\pi i n \kappa^*} \chi_{j,\kappa}^*(\xi)] d\kappa. \end{aligned} \quad (\text{I.3})$$

A contribuição de cada termo $A(\xi) \kappa^\beta$ na expansão de $\chi_{j,\kappa}(\xi)$ perto de $\kappa = 0$ será

$$\int_{\bar{C}} [A(\xi) e^{2\pi i n \kappa} \kappa^\beta - A^*(\xi) e^{-2\pi i n \kappa^*} (\kappa^\beta)^*] d\kappa, \quad (\text{I.4})$$

onde o corte de ramificação de κ^β é escolhido em $\text{Re}(\kappa) = 0$ e $\text{Im}(\kappa) > 0$. Introduzindo a variável $z = 2\pi i n \kappa$, a Eq. (I.4) toma a forma

$$\frac{1}{(2\pi)^\beta n^{\beta+1}} \frac{1}{2\pi i} \int_H [A(\xi) e^z (-iz)^\beta - A^*(\xi) e^{z^*} ((-iz)^\beta)^*] dz, \quad (\text{I.5})$$

onde z passa pela linha $\text{Im}(z) = \delta$, de $\text{Re}(z) = 0$ para $\text{Re}(z) \rightarrow -\infty$. Aqui dz é real e o

termo é reescrito como

$$\frac{1}{(2\pi)^\beta n^{\beta+1}} \left[\frac{A(\xi)}{2\pi i} \int_H e^z (-iz)^\beta dz + \text{c.c.} \right] = \frac{2}{(2\pi)^\beta n^{\beta+1}} \operatorname{Re} \left[\frac{A(\xi)}{2\pi i} \int_H e^z (-iz)^\beta dz \right]. \quad (\text{I.6})$$

Além disso,

$$\frac{1}{2\pi i} \int_H e^z (-iz)^\beta dz = \frac{e^{\pi i \beta / 2}}{2i \operatorname{sen}(\pi \beta) \Gamma(-\beta)}. \quad (\text{I.7})$$

Assim, a contribuição do termo $A(\xi) \kappa^\beta$ é dada por

$$\frac{\operatorname{Re} [-i A(\xi) e^{\pi i \beta / 2}]}{(2\pi)^\beta \operatorname{sen}(\pi \beta) \Gamma(-\beta) n^{\beta+1}}. \quad (\text{I.8})$$

Quando $\beta = \alpha$ e $A(\xi) = R_\alpha$ é real, a expressão (I.8) se reduz a

$$\frac{R_\alpha \operatorname{Re} [-i e^{\pi i \alpha / 2}]}{(2\pi)^\alpha \operatorname{sen}(\pi \alpha) \Gamma(-\alpha) n^{\alpha+1}} = \frac{R_\alpha \sec(\pi \alpha / 2)}{2 (2\pi)^\alpha \Gamma(-\alpha) n^{\alpha+1}}. \quad (\text{I.9})$$

Para $\beta = \alpha + 1$ e $A(\xi) = i I_{\alpha+1}$ imaginário, a expressão se reduz a

$$\frac{I_{\alpha+1} \operatorname{Re} [e^{\pi i (\alpha+1) / 2}]}{(2\pi)^{\alpha+1} \operatorname{sen}(\pi (\alpha+1)) \Gamma(-\alpha-1) n^{\alpha+2}} = \frac{I_{\alpha+1} \sec(\pi \alpha / 2)}{2 (2\pi)^{\alpha+1} \Gamma(-\alpha-1) n^{\alpha+2}}. \quad (\text{I.10})$$

Para $n < 0$, as mesmas ideias se aplicam. Os contornos devem ser desenhados abaixo do eixo real κ . Os resultados dos mesmos que acima, mas com $-n$ ao invés de n .

Referências Bibliográficas

- [1] ROMANO, M. C. *Funções de Wannier para cristais fotônicos unidimensionais*. 64 p. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual Paulista ‘Júlio de Mesquita Filho’, Bauru, 2011.
- [2] MARANA, N. L. *Estudo computacional do óxido de zinco puro e dopado com metais de transição: bulk, superfícies, interfaces e nanotubos*. 195 p. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual Paulista ‘Júlio de Mesquita Filho’, Bauru, 2017.
- [3] JUNIOR, W. D. C.; RETHWISCH, D. G. *Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução*. Rio de Janeiro: LTC, 2000. 912 p.
- [4] SHACKELFORD, J. F. *Ciência dos Materiais*. Rio de Janeiro: Pearson Education, 2000. 912 p.
- [5] MARDER, M. P. *Condensed Matter Physics*. Washington: John Wiley & Sons, 2011.
- [6] MADELUNG, O. *Introduction to Solid-State Theory*. [S.l.]: Springer, 1995.
- [7] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. São Paulo: Cengage Learning, 2011. 870 p.
- [8] FOTO de Felix Bloch. 2018. https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1952/bloch-bio.html.
- [9] PRÊMIO Nobel de Física de 1952. 2018. https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1952/.
- [10] KOHN, W. Analytic Properties of Bloch Waves and Wannier Functions. *Physical Review*, v. 115, p. 809–821, 1959.

- [11] BRUNO-ALFONSO, A.; NACBAR, D. R. Wannier functions of isolated bands in one-dimensional crystals. *Physical Review B*, v. 75, p. 115428, 2007.
- [12] MARZARI, N. et al. Maximally localized Wannier functions: Theory and applications. *Reviews of Modern Physics*, v. 84, p. 1419–1475, 2012.
- [13] FOTO de Gregory Hugh Wannier. 2018. <https://www.aip.org/history-programs/niels-bohr-library/oral-histories/4937>.
- [14] RIBEIRO, A. V. *Cálculo de Funções de Wannier para Nanomateriais: cumuleno e grafeno*. 157 p. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual Paulista ‘Júlio de Mesquita Filho’, Bauru, 2017.
- [15] BUTLER, F. A.; ZWICKER, R. Wannier functions with a simple model potential. *Solid State Communications*, v. 13, n. 7, p. 837–838, 1973.
- [16] PEDERSEN, F. B.; EINEVOLL, G. T.; HEMMER, P. C. Wannier functions for the Kronig-Penney model. *Physical Review B*, v. 44, p. 5470–5475, 1991.
- [17] HE, L.; VANDERBILT, D. Exponential Decay Properties of Wannier Functions and Related Quantities. *Physical Review Letters*, v. 86, p. 5341–5344, 2001.
- [18] BRUNO-ALFONSO, A.; HAI, G.-Q. Bloch-Kohn and Wannier-Kohn functions in one dimension. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 15, n. 40, p. 6701, 2003.
- [19] KOHN, W. Construction of Wannier functions and applications to energy bands. *Physical Review B*, v. 7, n. 10, p. 4388–4398, 1973.
- [20] MOREIRA, J.; PARADA, N. Localized Wannier functions. *Solid State Communications*, v. 16, n. 5, p. 561–562, 1975.
- [21] MARZARI, N.; VANDERBILT, D. Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands. *Physical Review B*, v. 56, n. 20, p. 12847–12865, 1997.
- [22] NACBAR, D. R.; BRUNO-ALFONSO, A. Analytical optimization of spread and change of exponential decay of generalized Wannier functions in one dimension. *Physical Review B*, v. 85, p. 195127, 2012.

- [23] NACBAR, D. R. *Funções de Wannier Generalizadas para aplicações em Ciência dos Materiais*. 118 p. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual Paulista ‘Júlio de Mesquita Filho’, Bauru, 2012.
- [24] VARALTA, N.; GOMES, A. V.; CAMARGO, R. d. F. A prelude to the fractional calculus applied to tumor dynamic. *TEMA (São Carlos)*, v. 15, n. 2, p. 211–221, 2014.
- [25] OLIVEIRA, E. C. de; COSTA, F. S.; VAZ, J. The fractional Schrödinger equation for delta potentials. *Journal of Mathematical Physics*, v. 51, n. 12, p. 12351, 2010.
- [26] JAROSZ, S. *A Equação de Schrödinger Fracionária com Potenciais Delta*. 147 p. Dissertação (Mestrado) — UNICAMP, Campinas, 2016.
- [27] HERRMANN, R. *Fractional Calculus: An Introduction for Physicists*. New Jersey: World Scientific, 2014. 500 p.
- [28] CAMARGO, R. F.; OLIVEIRA, E. C. de. *Cálculo Fracionário*. São Paulo: Livraria da Física, 2015. 184 p.
- [29] KURODA, L. K. B. et al. Unexpected behavior of Caputo fractional derivative. *Computational and Applied Mathematics*, v. 36, n. 3, p. 1173–1183, 2017.
- [30] OLIVEIRA, E. Capelas de; MACHADO, J. T. A Review of Definitions for Fractional Derivatives and Integral. *Mathematical Problems in Engineering*, v. 2014, p. 1–6, 2014.
- [31] ANDERSON, D. R.; ULNESS, D. J. Properties of the Katugampola fractional derivative with potential application in quantum mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, v. 56, n. 6, p. 063502, 2015.
- [32] RIESZ, M. L’intégrale de Riemann-Liouville et le problème de Cauchy. *Acta Mathematica*, v. 81, n. 1, p. 1–222, 1949.
- [33] FOTO de Erwin Schrödinger. 2018. https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1933/schrodinger-bio.html.
- [34] SCHRÖDINGER, E. An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules. *Physical Review*, v. 28, p. 1049–1070, 1926.

- [35] LASKIN, N. Fractional Schrödinger equation. *Physical Review E*, v. 66, p. 056108, 2002.
- [36] ORTIGUEIRA, M. D.; MACHADO, J. T. What is a fractional derivative? *Journal of Computational Physics*, v. 293, p. 4 – 13, 2015.
- [37] KATUGAMPOLA, U. N. Correction to ‘What is a fractional derivative?’ by Ortigueira and Machado [Journal of Computational Physics, Volume 293, 15 July 2015, Pages 4 - 13. Special issue on Fractional PDEs]. *Journal of Computational Physics*, v. 321, p. 1255–1257, 2016.
- [38] VELLASCO-GOMES, A.; CAMARGO, R. de F.; BRUNO-ALFONSO, A. Não localidade da derivada fracionária de Riesz: exemplos. In: SBMAC. III ERMAC - Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional - Caderno de trabalhos completos e resumos. Bauru, 2016. p. 358.
- [39] JENG, M. et al. On the nonlocality of the fractional Schrödinger equation. *Journal of Mathematical Physics*, v. 51, n. 6, p. 062102, 2010.
- [40] LUCHKO, Y. Fractional Schrödinger equation for a particle moving in a potential well. *Journal of Mathematical Physics*, v. 54, n. 1, p. 012111, 2013.
- [41] DONG, J.; XU, M. Applications of continuity and discontinuity of a fractional derivative of the wave functions to fractional quantum mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, v. 49, n. 5, p. 052105, 2008.
- [42] KRONIG, R. de L.; PENNEY, W. G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Proceedings of the Royal Society A*, v. 130, n. 814, p. 499–513, 1931.
- [43] WOLFE, J. C. Summary of the Kronig-Penney electron. *American Journal of Physics*, v. 46, n. 10, p. 1012–1014, 1978.
- [44] SINGH, S. Kronig-Penney model in reciprocal lattice space. *American Journal of Physics*, v. 51, n. 2, p. 179–179, 1983.
- [45] TARE, J. D.; ESGUERRA, J. P. H. Bound states for multiple Dirac- δ wells in space-fractional quantum mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, v. 55, n. 1, p. 012106, 2014.

- [46] BAYIN, S. S. On the consistency of the solutions of the space fractional Schrödinger equation. *Journal of Mathematical Physics*, v. 53, n. 4, p. 042105, 2012.
- [47] BAYIN, S. S. Comment on “On the consistency of the solutions of the space fractional Schrödinger equation. *Journal of Mathematical Physics*, v. 53, n. 8, p. 084101, 2012.
- [48] HAWKINS, E.; SCHWARZ, J. M. Comment on “On the consistency of solutions of the space fractional Schrödinger equation. *Journal of Mathematical Physics*, v. 54, n. 1, p. 014101, 2013.
- [49] KRONIG, R. D. L.; PENNEY, W. G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *The Royal Society*, v. 130, n. 814, p. 499–513, 1931.
- [50] NACBAR, D. R. *Cálculo de Funções de Wannier Eletrônicas para aplicações em Ciência dos Materiais*. 120 p. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual Paulista ‘Júlio de Mesquita Filho’, Bauru, 2007.
- [51] KITTEL, C. *Introduction to Solid State Physics*. 8. ed. Hoboken: Wiley & Sons, 2004. 680 p.
- [52] SAXON, D. S.; HUTNER, R. A. Some electronic properties of a one-dimensional crystal model. *Philips Research Reports*, v. 4, n. 2, p. 81–122, 1949.
- [53] STESLICKA, M.; SENGUPTA, S. Kronig-Penney model for impurity states. *Physica*, v. 54, n. 3, p. 402 – 410, 1971.
- [54] MIHÓKOVÁ, E.; SCHULMAN, L. Energy bands and gaps near an impurity. *Physics Letters A*, v. 380, n. 41, p. 3430 – 3433, 2016.
- [55] SCHRUM, D.; PEAT, F. Localized states of a one-dimensional crystal model. *Physica*, v. 39, n. 1, p. 94 – 106, 1968.
- [56] KLOS, J. W.; TKACHENKO, V. S. Symmetry-related criteria for the occurrence of defect states in magnonic superlattices. *Journal of Applied Physics*, v. 113, n. 13, p. 133907, 2013.
- [57] IGUCHI, K. Saxon-Hutner-Luttinger theorem in various physical models in one dimension. *Physics Review B*, American Physical Society, v. 51, p. 12268–12275, 1995.

- [58] COSTA, F. S. *Função H de Fox e Aplicações no Cálculo Fracionário*. 140 p. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Campinas, 2011.
- [59] EISBERG, R. M.; RESNICKI, R. *Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*. [S.l.]: Campus, 1985. 928 p.
- [60] POHL, H. A. *Introdução à Mecânica Quântica*. São Paulo: Edgar Blucher LTDA, 1973. 116 p.
- [61] TIPLER, P. A.; LLEWELLYN, R. A. *Física Moderna*. Rio De Janeiro: LTC, 2006. 478 p.
- [62] YOUNG, H. D.; FREEDMAN, R. A. *Física IV: ótica e física moderna*. São Paulo: Pearson Addison Wesley, 2004. 448 p.
- [63] PAIS, A. Max Born's statistical interpretation of quantum mechanics. *Science*, v. 218, n. 4578, p. 1193–1198, 1982.
- [64] JESUS, V. L. B.; OLIVEIRA, I. S. *Introdução à Física do Estado Sólido*. São Paulo: Livraria da Física, 2005. 384 p.
- [65] CONTHARTEZE, E. *Equações diferenciais fracionárias e as funções de Mittag-Leffler*. 152 p. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Campinas, 2014.
- [66] CAMARGO, R. F. *Cálculo fracionário e aplicações*. 141 p. Tese (Doutorado) — IMECC UNICAMP, Campinas, 2009.
- [67] HATZINIKITAS, A. N. The weakly coupled fractional one-dimensional Schrödinger operator with index $1 < \alpha \leq 2$. *Journal of Mathematical Physics*, v. 51, n. 12, p. 123523, 2010.
- [68] SWEILAM, N.; HASAN, M. A. Numerical solutions for 2-D fractional Schrödinger equation with the Riesz-Feller derivative. *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 140, p. 53 – 68, 2017.
- [69] WANG, P.; HUANG, C. Split-step alternating direction implicit difference scheme for the fractional Schrödinger equation in two dimensions. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 71, n. 5, p. 1114 – 1128, 2016.

- [70] PÉREZ-JORDÁ, J. M. Variational solution of the three-dimensional Schrödinger equation using plane waves in adaptive coordinates. *The Journal of Chemical Physics*, v. 135, n. 20, p. 204104, 2011.
- [71] DONG, J. Generalized Lippmann-Schwinger equation in the fractional quantum mechanics. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 44, n. 21, p. 215204, 2011.
- [72] HERRMANN, R. The fractional Schrödinger equation and the infinite potential well - numerical results using the Riesz derivative. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1210.4410v2>>.
- [73] Wolfram Research, Inc. *Mathematica, Version 10.4*. Champaign, IL, 2016.
- [74] Copyright. In: GRADSHTEYN, I.; RYZHIK, I. (Ed.). *Table of Integrals, Series, and Products (Corrected and Enlarged Edition)*. 7. ed. AMSTERDAM: Academic Press, 1980. p. 1184.
- [75] ROMANO, M. C.; NACBAR, D. R.; BRUNO-ALFONSO, A. Wannier functions of a one-dimensional photonic crystal with inversion symmetry. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, v. 43, n. 21, p. 215403, 2010.
- [76] RIBEIRO, A. V.; NACBAR, D. R.; BRUNO-ALFONSO, A. Wannier functions of cumulene: A tight-binding approach. *physica status solidi (b)*, v. 253, n. 3, p. 604–604, 2016.
- [77] ROMANO, M. C.; VELLASCO-GOMES, A.; BRUNO-ALFONSO, A. Wannier functions and the calculation of localized modes in one-dimensional photonic crystals. *J. Opt. Soc. Am. B*, v. 35, n. 4, p. 826–834, 2018.
- [78] ALBEVERIO, S. et al. The spectrum of the three-dimensional Kronig - Penney model with random point defects. *Advances in Applied Mathematics*, v. 3, n. 4, p. 435–440, 1982.
- [79] OLVER, P.; SHAKIBAN, C. *Applied Linear Algebra*. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2006. 736 p.

- [80] ANTON, H.; BUSBY, R. C. *Álgebra Linear Contemporânea*. Porto Alegre: ARTMED - Bookman, 2006. 610 p.
- [81] LIMA, P. E. de; SOUZA, L. F. R. de. Autovalores e Autovetores: conceitos e uma aplicação a um sistema dinâmico. *Revista Eletrônica de Educação e Ciência (REEC)*, v. 3, p. 22–28, 2013.
- [82] OLIVEIRA, D. E. de. *Sobre um método assemelhado ao de Francis para a determinação de autovalores de matrizes*. 85 p. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista ‘Júlio de Mesquita Filho’, São José do Rio Preto, 2006.
- [83] GONCALVES, E. M.; CRUZ, L. F. da; CHUEIRI, V. M. M. *Introdução ao estudo da Álgebra Linear*. São Paulo: Cultura Acadêmica, 2012. 328 p.
- [84] SHIFRIN, T.; ADAMS, M. R. *Álgebra Linear: uma abordagem geométrica*. Rio de Janeiro: LTC, 2013.
- [85] AZAMBUJA, H. F. de. *A função delta: propriedades e aplicações*. 166 p. Tese (Doutorado) — Universidade do Rio Grande do Sul. Escola de Engenharia, Porto Alegre, 1964.
- [86] CORDARO, P. D.; KAWANO, A. *O Delta de Dirac - Uma introdução à teoria das Distribuições para a engenharia*. São Paulo: Livraria da Física, 2002. 74 p.
- [87] BUTKOV, E. *Física Matemática*. São Paulo: Livraria da Física, 1988. 724 p.
- [88] HARTMANN, W. M. *Signals, sound, and sensation*. East Lansing: American Institute of Physics, 2004. 647 p.
- [89] HEAVISIDE Step Function. 2018. <http://mathworld.wolfram.com/HeavisideStepFunction.html>.
- [90] KNOPP, K. *Theory and Application of Infinite Series*. London: Blackie & Limited, 1951.
- [91] EDWARDS, H. M. *Riemann's Zeta Function*. Mineola: Academic Press, 1974.

- [92] LERCH, M. Note sur la fonction $\mathcal{L}(\omega, x, s) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{2k\pi ix}}{(\omega+k)^s}$. *Acta Math*, v. 11, p. 19–24, 1887.
- [93] FOTO de Mathias Lerch. 2018. https://en.wikipedia.org/wiki/Mathias_Lerch.
- [94] LIPSCHITZ, R. O. S. Untersuchung einer aus vier elementen gebildeten reihe. *J. Reine Angew. Math*, v. 54, p. 313–328, 1857.
- [95] FOTO de Rudolf Otto Sigismund Lipschitz. 2018. https://en.wikipedia.org/wiki/Rudolf_Lipschitz.
- [96] LAURINCIKAS, A.; GARUNKSTIS, R. *The Lerch zeta-function*. Dordrecht: Springer Science & Business Media, 2013. 189 p.
- [97] CICCARIELLO, S. The Lerch function and the thermodynamical functions of the ideal quantum gases. *Journal of Mathematical Physics*, v. 45, n. 8, p. 3353–3361, 2004.
- [98] GUILLERA, J.; SONADOW, J. Double integrals and infinite products for some classical constants via analytic continuations of Lerch's transcendent. *The Ramanujan Journal*, v. 16, n. 3, p. 247–270, 2008.
- [99] SUN, Z.; LI, A.; QIN, H. Representation of Multiple Integrals via the Generalized Lerch Transcendent. *International Journal of Applied Mathematics*, v. 46, n. 4, 2016.
- [100] NAVAS, L. M.; RUIZ, F. J.; VARONA, J. L. Asymptotic behavior of the Lerch transcendent function. *Journal of Approximation Theory*, v. 170, p. 21 – 31, 2013.
- [101] LAGARIAS, J. C.; LI, W.-C. W. The Lerch Zeta function III. Polylogarithms and special values. *Research in the Mathematical Sciences*, v. 3, n. 1, p. 2, 2016.