Referências

[1] Ver, por exemplo, os capítulos 12, 13 e 14 de P. Fulde, Electron Correlations in Molecules and Solids (Springer-Verlag,Berlin,1993).

[2] T. Izuyama, D. Kim e R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan **18**, 1025 (1963).

[3] P. Krüger e P. Schuck, Europhys. Lett. **27**, 395 (1994).

[4] S. Schäfer e P. Schuck, Phys. Rev. B**59**, 1712 (1999).

[5] E.H. Lieb e E.Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).

[6] J. Voit, Rep. Prog. Phys. **58**, 977 (1995).

[7] J. Carmelo e D. Baeriswyl, Phys. Rev. B**37**, 7541 (1988). Ver também M. Ogata e H. Shiba, Phys. Rev. B**41**, 2326 (1990).

[8] R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan **17**, 1100 (1962).

[9] D. N. Zubarev, Nonequilibrium Statistical Thermodynamic (Plenum, London, 1974).

[10] S. Sorella, E. Tosatti, S. Baroni, R. Car e M. Parinello, Int. J. Mod. Phys. B**1**, 993 (1988).

[11] E.C. Stoner, J. Phys. Radium **12**, 3772 (1951)

[12] Ver A. A. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP **30**, 1160 (1970) e C. F. Coll, III, Phys. Rev. B**9**, 2150 (1974).

[13] Y. Tomio e Y. Suzumura, J. Phys. Soc. Japan **69**, 796 (2000).

[14] D. Jerome e H. Schulz, Adv. Phys. **31**, 299 (1982).

[15] P. Lederer e C. M. Chaves, Phys. Rev. B**58**, 3302 (1998-II).

[16] T. Ishiguro e K. Yamaji, Organic Superconductors (Springer-Verlag, Berlim,1990).

[17] Conjugated Conducting Polymers, editado por H. G. Keiss, (Springer-Verlag, Berlim,1992).

[18] V. J. Emery em *Highly Conducting One-Dimensional Solids*, editado por J. Devreese, R.Evrand e V. van Doren (Plenum, New York, 1979).

[19] Y. Tomio, N. Dupuis e Y. Suzumura, Phys. Rev. B **64**, 125123 (2001).

[20] Lourival Manoel da Silva Filho e C. M. Chaves, a ser publicado (2003).

[21] D. Cabib e E. Callen, Phys. Rev. B **12**, 5249 (1975).

[22] B. Fourcade e G. Sproken, Phys. Rev. B **29**, 5089 (1984).

[23] B. Fourcade e G. Sproken, Phys. Rev. B **29**, 5096 (1984).

[24] D. M. Luz e R. R. dos Santos, Phys. Rev. B **54**, 1302 (1996).

[25] J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. **53**, 2327 (1984).

[26] J. Voit, Phys. Rev. B **45**, 4027 (1992).

[27] J. Kosterlitz, J. Phys. C **7**, 1046 (1974).

[28] M. Nakamura, Phys. Rev. B **61**, 16377 (2000).

[29] P. Sengupta, A. W. Sandvik e D. Campbell, Phys. Rev. B **65**, 155113 (2002).

[30] E. Jeckelmann, Phys. Rev. Lett. **89**, 236401 (2002).

[31] P. Sengupta, A. W. Sandvik e D. Campbell, Phys. Rev. Lett. **91**, 089701 (2003).

[32] E. Jeckelmann, Phys. Rev. Lett. **91**, 089702 (2003).

A
Teorema Espectral

A função de correlação temporal de dois operadores $A(t)$ e $B(t')$ é

$$F_{BA}(t,t') = \langle B(t')A(t)\rangle \tag{A.1}$$

e

$$F_{AB}(t,t') = \langle A(t)B(t')\rangle \tag{A.2}$$

onde $\langle ...\rangle$denota o valor médio estatístico. Seja $J(\omega)$ a transformada de Fourier de F_{BA}. Então[9] para $t = t'$

$$\langle BA\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)\ d\omega \tag{A.3}$$

e

$$\langle AB\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)\ e^{\beta\omega} d\omega \tag{A.4}$$

onde β é o inverso da temperatura. Vimos no capítulo 2 que as funções de Green (FG), eq.(2.1), envolvem o comutador a tempos iguais. Mas

$$\langle [A,B]\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)\ (e^{\beta\omega}-1)\ d\omega \tag{A.5}$$

Como[9]

$$\begin{aligned} J(\omega) &= \lim_{\xi\to 0}\frac{i}{e^{\beta\omega}-1}\left\{\langle\langle A;B\rangle\rangle_{\omega+i\xi} - \langle\langle A;B\rangle\rangle_{\omega-i\xi}\right\} \\ J(\omega) &= \frac{-2}{e^{\beta\omega}-1} Im\langle\langle A;B\rangle\rangle_{\omega}^{\text{ret}} \end{aligned} \tag{A.6}$$

obtemos

$$\langle [A,B]\rangle = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} Im\langle\langle A;B\rangle\rangle_{\omega}^{\text{ret}} d\omega \tag{A.7}$$

Para os operadores A e B

$$\begin{aligned} A &= a_{k\sigma}^{+} a_{k+q\sigma} \\ B &= a_{k+q\sigma}^{+} a_{k\sigma} = A^{+}\ , \end{aligned} \tag{A.8}$$

o valor médio do comutador $[A,B]$ é

$$\langle [A, B] \rangle = n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma} \ , \tag{A.9}$$

que substituido em (A.7) dá

$$n_{k\sigma} = n_{k+q\sigma} - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ImG_{k\sigma k\sigma}(q, \omega) \ d\omega \tag{A.10}$$

onde

$$G_{k\sigma p\sigma'}(q, \omega) = \langle\langle a^{+}_{k\sigma} a_{k+q\sigma}; a^{+}_{p+q\sigma'} a_{p\sigma'} \rangle\rangle_{\omega} \ . \tag{A.11}$$

Somando-se a eq.(A.10) sobre os momentos q

$$n_{k\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{q} n_{k+q\sigma} - \frac{1}{N\pi} \sum_{q} \int_{-\infty}^{\infty} ImG_{k\sigma k\sigma}(q, \omega) \ d\omega \tag{A.12}$$

obtemos

$$n_{k\sigma} = \langle n_{\sigma} \rangle - \frac{1}{N\pi} \sum_{q} \int_{-\infty}^{\infty} ImG_{k\sigma k\sigma}(q, \omega) \ d\omega \tag{A.13}$$

onde $\langle n_{\sigma} \rangle$ é o número de elétrons σ por sítio.

B
Cálculo da susceptibilidade livre, $\chi^0(q,\omega)$

A susceptibilidade livre pode ser calculada a partir da eq.(2.53) no limite contínuo, considerando o número de ocupação não renormalizado,

$$n_{k\sigma}^{HF} = \theta(E_F - \varepsilon_k), \tag{B.1}$$

a função degrau em $T = 0K$. Na fase paramagnética $n_{k\uparrow} = n_{k\downarrow} \equiv n_k$ e $\chi^0_\uparrow = \chi^0_\downarrow \equiv \chi^0$. Assim,

$$\chi^0(q,\omega) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{n_k - n_{k+q}}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) + i\xi} \tag{B.2}$$

que considerando a identidade

$$\lim_{\xi \to 0^+} \frac{1}{x \pm i\xi} = P\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x), \tag{B.3}$$

fornece para as partes real e imaginária de $\chi^0(w,\omega)$:

$$Re\chi^0(q,\omega) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{n_k - n_{k+q}}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)} \tag{B.4a}$$

$$Im\chi^0(q,\omega) = -\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2} (n_k - n_{k+q})\delta(\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)) \tag{B.4b}$$

Em (B.3), P denota a parte principal da integral de $\frac{1}{x}$.

Cálculo da parte real:

$$Re\chi^0 = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{n_k}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)} - \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{n_{k+q}}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)} \ .$$

Fazendo $k + q \to k$ na segunda integral

$$Re\chi^0 = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{n_k}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)} - \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{n_k}{\omega - (\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q})} \ ,$$

e $k \to -k$ na segunda integral, obtemos:

$$Re\chi^0 = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} n_k \left[\frac{1}{\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)} - \frac{1}{\omega + (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)} \right].$$

Mas

$$\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k = -2\cos(k+q) + 2\cos k = 4 \,\mathrm{sen}\,(k + q/2)\,\mathrm{sen}\,q/2$$

pois

$$\varepsilon_k = -2\cos k.$$

Então

$$Re\chi^0 = \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \frac{8\,\mathrm{sen}\,(k+\frac{q}{2})\,\mathrm{sen}\,\frac{q}{2}}{\omega^2 - 16\,\mathrm{sen}^2(k+q/2)\,\mathrm{sen}^2 q/2}\ , \tag{B.5}$$

onde se observa que $Re\chi^0$ é simétrico em ω. Esta relação pode ser reescrita como:

$$Re\chi^0 = \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \frac{8\,\mathrm{sen}\,(k+\frac{q}{2})\,\mathrm{sen}\,\frac{q}{2}}{\omega^2 - 16\,\mathrm{sen}^2 q/2 + 16\cos^2(k+q/2)\,\mathrm{sen}^2 q/2}$$

onde também se nota a simetria nos momentos q. Fazendo a transformação: $k+q/2 \to k$, temos

$$Re\chi^0 = \frac{4}{\pi} \int_{-k_F+\frac{q}{2}}^{k_F+\frac{q}{2}} dk \frac{\mathrm{sen}\,k\,\mathrm{sen}\,\frac{q}{2}}{\omega^2 - 16\,\mathrm{sen}^2 q/2 + 16\cos^2 k\,\mathrm{sen}^2 q/2}\ . \tag{B.6}$$

Definamos $\omega^2 - 16\,\mathrm{sen}^2 q/2 = -z$ e $u = \cos k$; com isto

$$Re\chi^0 = -\frac{4}{\pi}\,\mathrm{sen}\,\frac{q}{2} \int \frac{du}{-z + 16u^2\,\mathrm{sen}^2 q/2}$$

$$Re\chi^0 = -\frac{1}{4\pi\,\mathrm{sen}\,\frac{q}{2}} \int \frac{du}{u^2 \mp a^2} \qquad , \qquad a = \text{real}$$

onde

$$a^2 = \frac{z}{16\,\mathrm{sen}^2\frac{q}{2}} \qquad \text{se } z > 0$$

$$a^2 = \frac{|z|}{16\,\mathrm{sen}^2\frac{q}{2}} \qquad \text{se } z < 0 \tag{B.7}$$

A integral vai de $u_m = cos(-k_F + q/2)$ a $u_M = cos(k_F + q/2)$. O sinal $-(+)$ se aplica para $z > 0 (z < 0)$.
Se $z < 0$, a integral dá

$$\frac{1}{a}\,\mathrm{arctg}\,\frac{u}{a}$$

e

$$Re\chi^0 = \frac{-1}{\pi |z|^{1/2}} \left\{ \mathrm{arctg}\,\left[\frac{\cos(k_F+\frac{q}{2})}{|z|^{1/2}/4\,\mathrm{sen}\,\frac{q}{2}}\right] - \mathrm{arctg}\,\left[\frac{\cos(-k_F+\frac{q}{2})}{|z|^{1/2}/4\,\mathrm{sen}\,\frac{q}{2}}\right]\right\}$$

$$Re\chi^0 = \frac{1}{\pi |z|^{1/2}} \left\{ \mathrm{arctg}\left[\frac{|z|^{1/2}}{4\,\mathrm{sen}\,\frac{q}{2}\cos(k_F+\frac{q}{2})}\right] - \mathrm{arctg}\left[\frac{|z|^{1/2}}{4\,\mathrm{sen}\,\frac{q}{2}\cos(-k_F+\frac{q}{2})}\right]\right\} \tag{B.8}$$

Se $z > 0$ e $|u_{m,M}| > a$, a integral dá

$$-\frac{1}{a}\text{arc cotgh}\left(\frac{u}{a}\right) = -\frac{1}{a}\text{arctgh}\left(\frac{a}{u}\right)$$

e

$$Re\chi^0 = \frac{1}{\pi|z|^{1/2}}\left\{\text{arctgh}\left[\frac{|z|^{1/2}}{4\,\text{sen}\,\frac{q}{2}\cos(k_F+\frac{q}{2})}\right] - \text{arctgh}\left[\frac{|z|^{1/2}}{4\,\text{sen}\,\frac{q}{2}\cos(-k_F+\frac{q}{2})}\right]\right\} \tag{B.9}$$

Se $z > 0$ e $|u_{m,M}| < |a|$, a integral é

$$\frac{-1}{a}\text{arctgh}\frac{u}{a} = \frac{-1}{a}\text{arc cotgh}\frac{a}{u}$$

e

$$Re\chi^0 = \frac{1}{\pi|z|^{1/2}}\left\{\text{arc cotgh}\left[\frac{|z|^{1/2}}{4\,\text{sen}\,\frac{q}{2}\cos(k_F+\frac{q}{2})}\right] - \text{arc cotgh}\left[\frac{|z|^{1/2}}{4\,\text{sen}\,\frac{q}{2}\cos(-k_F+\frac{q}{2})}\right]\right\} \tag{B.10}$$

Cálculo da parte imaginária:

$$Im\chi^0 = -\frac{1}{2}\int_{-\pi}^{\pi} dk n_k \delta(\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)) + \frac{1}{2}\int_{-\pi}^{\pi} dk n_{k+q}\delta(\omega - (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)) \tag{B.11}$$

que utilizando as transformações $k+q \to k$ e em seguida, $k \to -k$ no segundo termo,e (B.1), se torna

$$Im\chi^0 = -\frac{1}{2}\int_{-k_F}^{k_F} \{\delta(\omega - 4\,\text{sen}\,(k+q/2)\,\text{sen}\,(q/2)) - \delta(\omega + 4\,\text{sen}\,(k+q/2)\,\text{sen}\,(q/2))\}\, dk$$

onde se observa a antissimetria em ω; a simetria em q se mostra facilmente.

Fazendo $k + q/2 \to k$,

$$Im\chi^0 = -\frac{1}{2}\int_{-k_F+q/2}^{k_F+q/2} dk \left\{\delta(\omega - 4\,\text{sen}\,k\,\text{sen}\,\frac{q}{2}) - \delta(\omega + 4\,\text{sen}\,k\,\text{sen}\,q/2)\right\} \tag{B.12}$$

Mas

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|\frac{df}{dx}(x_i)|}\delta(x - x_i) \tag{B.13}$$

onde os x_i são os zeros simples de $f(x)$.

Na primeira delta em (B.12),

$$f(k) = \omega - 4\,\text{sen}\,k\,\text{sen}\,\frac{q}{2}$$

cujos zeros simples são:

$$\operatorname{sen} k_i = \omega/4 \operatorname{sen}\frac{q}{2} \Rightarrow k_i = \operatorname{arcsen}(\omega/4 \operatorname{sen}\frac{q}{2}) \tag{B.14}$$

e

$$\cos k_i = \left(1 - \frac{\omega^2}{16 \operatorname{sen}^2\frac{q}{2}}\right)^{1/2} = \frac{|z|^{1/2}}{4\operatorname{sen}\frac{q}{2}} \ . \tag{B.15}$$

(B.14) existe se $\frac{|\omega|}{4|\operatorname{sen} q/2|} \leq 1$ ou $z \geq 0$. Se z for negativo, a função delta não é efetiva e esta contribuição se anula, o que corresponde à função degrau, $\theta(z)$. Como

$$\frac{d}{dk}f(k)\Big|_{k=k_i} = -4\cos k_i \operatorname{sen}\frac{q}{2} = -|z|^{1/2}$$

a contribuição da primeira delta dá :

$$(Im\chi^0(q,\omega))_1 = -\frac{\theta(z)}{2|z|^{1/2}}\int_{-k_F+q/2}^{k_F+q/2} dk\delta(k-k_i). \tag{B.16}$$

Esta contribuição será zero a menos que $-k_F + \frac{q}{2} < k_i < k_F + \frac{q}{2}$, o que , por sua vez, é equivalente à diferença entre duas funções θ:

$$\begin{aligned}(Im\chi^0(q,\omega)_1 = \frac{-\theta(z)}{2|z|^{1/2}}&\left\{\theta\left(k_i + k_F - \frac{q}{2}\right)\right.\\ &\left.- \theta\left(k_i - k_F - \frac{q}{2}\right)\right\}.\end{aligned} \tag{B.17}$$

Para a segunda função delta em (B.12) temos que

$$f(k) = \omega + 4\operatorname{sen} k \operatorname{sen}\frac{q}{2}.$$

Um cálculo semelhante ao anterior conduz a

$$\begin{aligned}(Im\chi^0(q,\omega)_2 = \frac{\theta(z)}{2|z|^{1/2}}&\left\{\theta\left(-k_i + k_F - \frac{q}{2}\right)\right.\\ &\left.- \theta\left(-k_i - k_F - \frac{q}{2}\right)\right\} \ .\end{aligned} \tag{B.18}$$

onde k_i é dado por (B.14). Após algumas manipulações algébricas, se pode verificar que a condição $k_i + k_F - \frac{q}{2} > 0$ é equivalente a
$E_F + \frac{|z|^{1/2}}{2}\operatorname{cotg}\frac{q}{2} + \frac{\omega}{2} > 0$.
Procedendo de maneira similar com as demais expressões, chegamos finalmente a

$$\begin{aligned}(Im\chi^0(q,\omega) = \frac{\theta(z)}{2|z|^{1/2}}&\left\{\theta\left(E_F - \frac{|z|^{1/2}}{2}\operatorname{cotg}\frac{q}{2} - \frac{\omega}{2}\right)\right.\\ &+ \theta\left(E_F + \frac{|z|^{1/2}}{2}\operatorname{cotg}\frac{q}{2} - \frac{\omega}{2}\right) - \theta\left(E_F + \frac{|z|^{1/2}}{2}\operatorname{cotg}\frac{q}{2} + \frac{\omega}{2}\right)\\ &\left.- \theta\left(E_F - \frac{|z|^{1/2}}{2}\operatorname{cotg}\frac{q}{2} + \frac{\omega}{2}\right)\right\}\end{aligned} \tag{B.19}$$

C
Teorema de Hellmann-Feynman

Consideremos a hamiltoniana de Hubbard (puro) descrita em termos de um parâmetro de acoplamento λ

$$H(\lambda) = \frac{U}{\lambda} H_0 + H_{\text{int}} \tag{C.1}$$

onde H_0 é o termo livre e H_{int} o de interação :

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} \\ H_{\text{int}} &= U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \end{aligned} \tag{C.2}$$

com $U > 0$. Para $\lambda = U$, temos que $H(U)$ vai corresponder ao modelo de Hubbard e, para λ tendendo ao infinito, $H(\infty)$ vai ao termo de interação.

Para uma ocupação $n \leq 1$, a energia do estado fundamental de $H(\infty)$ é nula, posto que é sempre possível distribuir os elétrons sem dupla ocupação.

A equação de Schödinger independente do tempo agora é

$$H(\lambda)|\psi_0(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi_0(\lambda)\rangle \tag{C.3}$$

onde $\psi_0(\lambda)$ é o vetor do estado fundamental que supusemos satisfazer a condição de normalização:

$$\langle\psi_0(\lambda)|\psi_0(\lambda)\rangle = 1 \tag{C.4}$$

para qualquer λ no intervalo (U, ∞). De (C.3)

$$E(\lambda) = \langle\psi_0(\lambda)|H(\lambda)|\psi_0(\lambda)\rangle, \tag{C.5}$$

e sua derivada em relação a λ é

$$\begin{aligned} \frac{dE(\lambda)}{d\lambda} &= \Big\langle \frac{d\psi_0(\lambda)}{d\lambda} |H(\lambda)|\psi_0(\lambda \Big\rangle + \Big\langle \psi_0(\lambda)|H(\lambda)| \frac{d\psi_0(\lambda}{d\lambda} \Big\rangle \\ &+ \Big\langle \psi_0(\lambda)| \frac{dH(\lambda)}{d\lambda} |\psi_0(\lambda) \Big\rangle \\ &= E(\lambda) \frac{d}{d\lambda} \langle\psi_0(\lambda)|\psi_0(\lambda)\rangle + \Big\langle \psi_0(\lambda)| \frac{dH(\lambda)}{d\lambda} |\psi_0(\lambda) \Big\rangle \end{aligned} \tag{C.6}$$

e

$$\frac{dE(\lambda)}{d\lambda} = \Big\langle \psi_0(\lambda) | \frac{dH(\lambda)}{d\lambda} | \psi_0(\lambda) \Big\rangle. \tag{C.7}$$

De (C.1) temos que

$$\frac{dH(\lambda)}{d\lambda} = -U \frac{H_0}{\lambda^2} \ , \tag{C.8}$$

e

$$\frac{dE(\lambda)}{d\lambda} = -U \Big\langle \psi_0(\lambda) | \frac{H_0}{\lambda^2} | \psi_0(\lambda) \Big\rangle \ , \tag{C.9}$$

que integrando entre U e ∞, fornece

$$E(\infty) - E(U) = -U \int_U^\infty \Big\langle \psi_0(\lambda) \Big| \frac{H_0}{\lambda^2} \Big| \psi_0(\lambda) \Big\rangle d\lambda \ . \tag{C.10}$$

Como $E(\infty)$ é nula, a energia do estado fundamental é dada por

$$E(U) = U \int_U^\infty \frac{T(\lambda)}{\lambda^2} \, d\lambda \tag{C.11}$$

com

$$T(\lambda) = \langle \psi_0(\lambda) | H_0 | \psi_0(\lambda) \rangle. \tag{C.12}$$

A demonstração permanece válida para a hamiltoniana de Hubbard estendida com termo de interação entre segundos vizinhos, i. é:

$$H_{\text{int}} = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V_1 \sum_i n_i n_{i+1} + V_2 \sum_i n_i n_{i+2} \ , \tag{C.13}$$

com V_1 e $V_2 > 0$, mas precisamos conhecer $E(\infty)$.

Vamos então determinar $E(\infty)$ para $n \leq 1$. Para $n = 1/2$, i. é, cadeias como preenchimento um quarto, podemos distribuir os elétrons como segue (numa notação óbvia):

$$\uparrow \circ \downarrow \circ \downarrow \circ \downarrow \circ \uparrow \quad , \quad E(\infty) = \frac{NV_2}{2} \tag{C.14a}$$

ou

$$\uparrow\downarrow \circ \circ \circ \uparrow\downarrow \circ \circ \circ \quad , \quad E(\infty) = \frac{NU}{4} \tag{C.14b}$$

ou

$$\uparrow \downarrow \circ \circ \downarrow \downarrow \circ \circ \quad , \quad E(\infty) = \frac{NV_1}{4} \tag{C.14c}$$

e a energia fundamental por sítio é a menor dentre:

$$E(U, V_1, V_2) = \frac{U}{N} \int_U^\infty \frac{T(\lambda)}{\lambda^2} \, d\lambda + \frac{V_2}{2} \tag{C.15a}$$

ou

$$E(U,V_1,V_2) = \frac{U}{N}\int_U^\infty \frac{T(\lambda)}{\lambda^2}\,d\lambda + \frac{U}{4} \tag{C.15b}$$

ou

$$E(U,V_1,V_2) = \frac{U}{N}\int_U^\infty \frac{T(\lambda)}{\lambda^2}\,d\lambda + \frac{V_1}{4} \tag{C.15c}$$

Para $n = 1$, distribuímos $m \leq \frac{N}{2}$ sítios duplamente ocupados com vizinhos desocupados (energia $(U+4V_2)m$). Os $N-2m$ elétrons restantes serão distribuídos por todos os demais sítios sem dupla ocupação (energia $(N-2m)(V_1+V_2)$), i. é:

$$\uparrow\downarrow \quad \circ \quad \uparrow\downarrow \quad \circ \quad \uparrow\downarrow \quad \circ \quad \uparrow\downarrow \quad \circ \quad \uparrow\downarrow \qquad E(\infty) : (U+4V_2)m \tag{C.16a}$$

$$\uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \downarrow \quad \uparrow \quad \downarrow \quad \uparrow \quad \downarrow \quad \uparrow \qquad E(\infty) : (N-2m)(V_1+V_2) \tag{C.16b}$$

Então,

$$\begin{aligned} E(\infty) &= (U+4V_2)m + (N-2m)(V_1+V_2) \\ &= (U+2V_2-2V_1)m + NV_1 + NV_2\ . \end{aligned} \tag{C.17}$$

Se $U + 2V_2 > 2V_1$, minimiza-se E com $m = 0$ e

$$E(\infty) = NV_1 + NV_2 \tag{C.18a}$$

(representação (C.16b)).
Se $U + 2V_2 < 2V_1$, minimiza-se E com $m = \frac{N}{2}$ e

$$E(\infty) = \frac{NU}{2} + 2NV_2 \tag{C.18b}$$

(representação (C.16a)). Assim, a energia do estado fundamental por sítio será

$$E(U,V_1,V_2) = \frac{U}{N}\int_U^\infty \frac{d\lambda T(\lambda)}{\lambda^2} + V_1 + V_2 \tag{C.19a}$$

para $U + 2V_2 > 2V_1$, e

$$E(U,V_1,V_2) = \frac{U}{N}\int_U^\infty \frac{d\lambda T(\lambda)}{\lambda^2} + \frac{U}{2} + 2V_2 \tag{C.19b}$$

para $U + 2V_2 < 2V_1$. Se V_2 é muito grande ($V_2 > max(U,V_1)/2$), a interação entre segundos vizinhos deve ser evitada, e o estado fundamental será:

$$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \circ \quad \circ \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \circ \quad \circ \tag{C.20}$$

com energia $E(\infty) = N(U/2 + V_1)$. Para valores intermediários dos parâmetros, a configuração

$$\uparrow\downarrow \quad \uparrow \quad \circ \quad \uparrow\downarrow \quad \downarrow \quad \circ \tag{C.21}$$

fornece o estado fundamental, com $E(\infty) = N(U + 2V_1 + 2V_2)/3$.

Quando $V_2 = 0$–modelo de Hubbard estendido sem interação entre os segundos vizinhos–temos para a energia do estado fundamental

$$E(U, V_1) = \frac{U}{N}\int_U^\infty \frac{d\lambda T(\lambda)}{\lambda^2} + min(V_1, \frac{U}{2}, \frac{U + 2V_1}{3}) \tag{C.22}$$

com a correspondente configuração .