

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Fases Geométricas, o Efeito Hall Quântico e Invariantes Topológicos

Rafael Emilio Barfknecht

Trabalho de Conclusão do Curso de
Bacharelado em Física realizado sob a ori-
entação do Professor Dr. Gerardo Guido
Martinez Pino.

Porto Alegre
Junho de 2013.

Agradecimentos

À minha família: meus pais, Valdair e Dilamar Barfknecht,
minha irmã, Aline Barfknecht;
Aos meus amigos e colegas, em especial a Lucas Secco,
pelas boas ideias, e a Matheus Heinemann, Guilherme Oliveira,
Mariana Timm, Felipe Selau e Amanda Azevedo;
Ao meu orientador, o Prof. Dr. Gerardo Guido Martinez Pino;
A Marion Lucia Silvestrini.

Resumo

O objetivo deste trabalho é realizar uma revisão teórica do efeito Hall quântico inteiro, descoberto em 1980 por Klaus von Klitzing e colaboradores. A quantização da condutividade Hall é interpretada através dos conceitos de fases geométricas e invariância de gauge, sob a perspectiva do experimento mental de Laughlin e da fórmula da resposta linear de Nakano-Kubo.

Abstract

The goal of this work is to make a theoretical revision of the integer quantum Hall effect, discovered in 1980 by Klaus von Klitzing and collaborators. The quantization of the Hall conductivity is interpreted through the concepts of geometrical phases and gauge invariance, from the perspective of Laughlin's thought experiment and of the Nakano-Kubo linear response formula.

Sumário

1	Introdução	2
2	Fases Geométricas e Fases Topológicas	3
2.1	O Potencial Vetor Magnético	3
2.2	Fases Geométricas	3
2.3	O Efeito Aharonov-Bohm	4
2.4	Campos de Gauge e Fases de Berry	5
3	O Efeito Hall Quântico	9
3.1	Plateaus da Condutividade Transversal no Efeito Hall Quântico	9
3.2	Função de Onda de uma Partícula Carregada em um Campo Magnético	11
3.3	A Quantização da Condutividade Hall	13
3.4	O Argumento de Laughlin	15
4	Invariantes Topológicos no Efeito Hall Quântico	21
4.1	Elétrons de Bloch num Campo Magnético	21
4.2	Resposta Linear e Fórmula de Nakano-Kubo	23
4.3	Estados de Borda	26
5	Resultados Recentes: Efeito Hall Quântico Fracionário	27
6	Conclusões e Trabalho Futuro	29
7	Apêndice: Dedução da Fórmula da Resposta Linear	30

1 Introdução

Um dos resultados experimentais mais interessantes da física é o Efeito Hall, descoberto em 1879 por Edwin Hall, cuja explicação teórica é solidamente sustentada pela teoria eletromagnética clássica e pelos primeiros modelos de elétrons livres para os metais [1] em sistemas tridimensionais.

Até o fim do século XX, conhecia-se em detalhes a maneira pela qual uma amostra metálica sujeita à atuação de um campo elétrico longitudinal e de um campo magnético perpendicular apresenta uma diferença de potencial transversal, chamada *voltagem Hall*, gerada pela força de Lorentz experimentada pelos portadores de carga em movimento na amostra. Conhecendo essas grandezas e outros parâmetros, como o número de portadores, é possível calcular grandezas como a condutividade Hall, incluindo o sinal da carga elétrica desses portadores.

Em 1980, no entanto, Klaus von Klitzing e seus colaboradores [2] demonstraram experimentalmente que a condutividade Hall, para uma amostra aproximadamente bidimensional mantida a baixas temperaturas, não apresentava o comportamento linear esperado em função da variação do campo magnético; ao contrário, a condutividade era quantizada em *plateaus*, que apresentavam-se de forma muito precisa como múltiplos inteiros do quadrado da carga do elétron dividida pela constante de Planck, de maneira indiferente à geometria da amostra ou à presença de impurezas.

Além de render a von Klitzing o prêmio Nobel de Física de 1985, o efeito Hall quântico inteiro, como foi chamado, gerou uma demanda por explicações teóricas que englobassem o caráter macroscópico da quantização da condutividade. Isso ocorreu em 1981, com o experimento mental (*Gedankenexperiment*) proposto por Robert Laughlin [3], em que os *plateaus* da condutividade Hall eram explicados em termos de fases geométricas e invariância de *gauge*. Desenvolvimentos semelhantes e equivalentes vieram posteriormente, como os cálculos baseados na fórmula de Nakano-Kubo propostos por Thouless, Kohmoto, Nightingale e den Nijs [4].

Nesse trabalho, será analisado o efeito Hall quântico inteiro de acordo com essas duas perspectivas: inicialmente, será feita a fundamentação teórica dos conceitos de fases geométricas, transformações adiabáticas e campos de *gauge*. Na terceira seção, serão apresentados os resultados experimentais que exigiram uma revisão teórica do efeito Hall, começando pelo estudo da função de onda de um elétron em um campo magnético, passando pela quantização da condutividade nos níveis de Landau e finalizando com a apresentação do argumento de Laughlin.

Na seção seguinte, será demonstrado como se pode obter de maneira equivalente o resultado de Laughlin, de acordo com o desenvolvimento de Mahito Kohmoto [5] segundo a fórmula da resposta linear, em que o elétron em um potencial periódico está sujeito a um campo magnético perpendicular à amostra e um campo elétrico perturbativo.

Por fim, serão apresentados resultados mais recentes, como o efeito Hall quântico fracionário e os isolantes topológicos - fenômenos cujas explicações estão intimamente relacionadas ao efeito Hall quântico inteiro - e serão feitas as conclusões visando o desenvolvimento futuro de pesquisa na área.

2 Fases Geométricas e Fases Topológicas

Nesta seção ¹, será demonstrado como a função de onda de uma partícula pode ser alterada pelo fator de fase referente a trajetórias realizadas em um campo definido pelo potencial vetor eletromagnético. Será estabelecida uma relação entre as fases geométricas, os campos de *gauge* e o efeito Aharonov-Bohm. Por fim, serão estudados o caso de uma partícula de spin 1/2 em um campo magnético e algumas particularidades das fases de Berry [6].

2.1 O Potencial Vetor Magnético

Um campo magnético \mathbf{B} pode ser derivado a partir de um potencial vetor $\mathbf{A} = (A_x, A_y, A_z)$ através de

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.1.1)$$

sendo que é possível acrescentar o gradiente de uma função escalar ω sem alterar o valor do campo magnético, ou seja

$$\mathbf{B} = \nabla \times (\mathbf{A} + \nabla\omega) = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (2.1.2)$$

já que $\nabla \times \nabla f = 0$, para qualquer função f . Esta liberdade de escolha de \mathbf{A} chama-se *invariância de gauge*. O potencial vetor \mathbf{A} denomina-se também campo de *gauge*².

2.2 Fases Geométricas

Considere agora uma partícula carregada q que realize uma trajetória circular em um campo magnético, como indica a Figura 1. O Hamiltoniano nesse caso é dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla - i\frac{q}{2\hbar}\mathbf{A} \right)^2 \quad (2.2.1)$$

¹Essa seção, bem como a seção 3 deste trabalho, são amplamente apoiadas no desenvolvimento teórico oferecido por Jiannis Pachos no livro *Introduction to Topological Quantum Computation*

²As transformações de *gauge* formam um grupo de Lie, também chamado de grupo de simetria. A cada grupo de Lie estão associadas funções chamadas *geradores* e uma álgebra de Lie específica. De cada gerador do grupo emerge um campo vetorial, chamado campo de *gauge*.

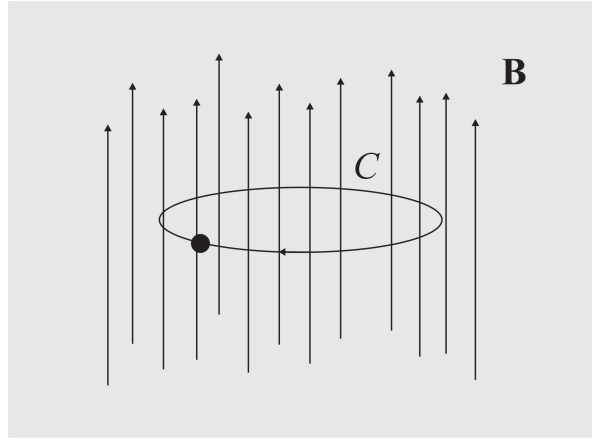


Figura 1: Uma partícula carregada realiza uma trajetória fechada C na presença de um campo magnético.

Se temos que $\psi(\mathbf{r})$ é um autoestado de H para $\mathbf{A} = 0$ então sabe-se [7] que o autoestado com a mesma energia para um potencial vetor genérico $\mathbf{A} \neq 0$ é dado por

$$\Psi(\mathbf{r}) = \exp\left(i\frac{q}{2\hbar} \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'\right) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.2.2)$$

onde \mathbf{r}_0 é um ponto de referência arbitrário e a integral de linha é definida ao longo de qualquer trajetória que liga os pontos \mathbf{r}_0 e \mathbf{r} . Suponha agora que a partícula é movida adiabaticamente³ ao longo de uma trajetória fechada C . Então, ao final dessa evolução cíclica, a função de onda adquire uma fase φ , ou seja $\Psi(\mathbf{r}) = \exp(i\varphi)\psi(\mathbf{r})$, onde

$$\varphi = \frac{q}{2\hbar} \oint_C \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}. \quad (2.2.3)$$

Aqui $d\mathbf{r}$ é um segmento do loop C . Utilizando o teorema de Stokes [9], esta fase pode ser escrita também como

$$\varphi = \frac{q}{2\hbar} \iint_{S(C)} \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \frac{q}{2\hbar} \iint_{S(C)} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \frac{q}{2\hbar} \Phi, \quad (2.2.4)$$

onde $S(C)$ é a superfície gerada por C , $d\mathbf{s}$ é um elemento de superfície de $S(C)$ e Φ é o fluxo de campo magnético que atravessa $S(C)$. Como essa fase depende de $\nabla \times \mathbf{A}$, ela é um invariante de *gauge*, já que podemos adicionar o gradiente de uma função escalar ao potencial vetor sem alterar o resultado final. Além disso, a função de onda não muda se adicionarmos um quantum de fluxo $\Phi_0 = 2\hbar/q$ ao sistema, já que, nesse caso, $\varphi = 2\pi$.

2.3 O Efeito Aharonov-Bohm

Consideremos agora uma composição em que o fluxo magnético está confinado a um solenóide dentro de um tubo isolado e infinito [7]. Tomamos então uma partícula carregada se movendo no plano do solenóide, como na Figura 2.

³O *teorema adiabático* afirma que um Hamiltoniano H pode ser alterado gradualmente, de modo que ele possa ser tratado como constante em cada instante de tempo, e a equação de Schrödinger independente do tempo é válida nesse caso [8].

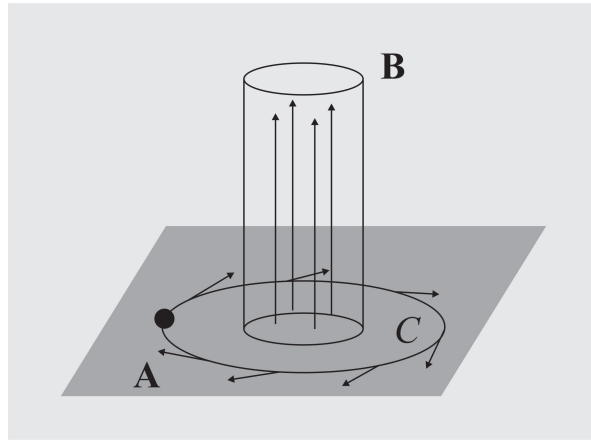


Figura 2: Uma partícula carregada realiza uma trajetória fechada C em torno de um solenóide isolado. No plano da trajetória, há somente o campo relacionado ao potencial vetor \mathbf{A} .

É possível demonstrar que a função de onda da partícula deve adquirir um fator de fase, mesmo que ela esteja se movendo em uma região livre de campos eletromagnéticos; esse fenômeno é denominado *efeito Aharonov-Bohm*. Para um campo magnético dentro de um solenóide muito fino, posicionado na origem, com um fluxo magnético Φ o atravessando, o potencial vetor é escrito como

$$\mathbf{A} = \left(-\frac{y\Phi}{2\pi r^2}, \frac{x\Phi}{2\pi r^2}, 0 \right) \quad (2.3.1)$$

onde $r = |\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2}$. Isso corresponde ao seguinte campo magnético

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \hat{\mathbf{z}}\Phi\delta(r). \quad (2.3.2)$$

Ou seja, o campo magnético é zero para $\mathbf{r} \neq 0$, ao passo que dá origem a fluxo Φ em $\mathbf{r} = 0$. O potencial vetor é paralelo ao plano, e dá origem a um fator de fase na função de onda, já que $\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$ é não-nula para qualquer circuito fechado C em torno do solenóide. O fator de fase é dado novamente pela eq. (2.2.4), onde Φ será o fluxo dentro do solenóide. Esse efeito tem caráter *topológico*, visto que independe do formato do trajeto fechado escolhido e é determinado apenas pelo número de voltas que a partícula realiza em torno do solenóide. Além disso, a realização experimental do efeito Aharonov-Bohm demonstrou que, embora a partícula não esteja interagindo com o campo magnético, sua função de onda responde ao potencial vetor não nulo na região externa ao solenóide, o que origina um fator de fase não-trivial.

2.4 Campos de Gauge e Fases de Berry

O entendimento das fases geométricas avançou consideravelmente quando Michael Berry [10] apresentou uma discussão na qual demonstrava que alguns fatores de fase, em especial aqueles que não podem ser eliminados através de uma transformação de *gauge*, devem receber uma interpretação física. Para analisar um caso desse tipo, recorreremos ao exemplo simples de uma partícula de spin 1/2 em um campo magnético. Consideramos um campo magnético $\mathbf{B}(\theta, \phi)$ com orientação dada pelos parâmetros θ e ϕ , sendo que $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \phi \leq 2\pi$, como indicado na Figura 3.

O Hamiltoniano desse sistema é dado por

$$H = -\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(\theta, \phi) = -\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}(\theta, \phi)B, \quad (2.4.1)$$

onde μ é o valor do momento magnético da partícula, $\hat{\mathbf{n}}(\theta, \phi) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ dá a orientação do campo magnético e $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ são as matrizes de Pauli:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.4.2)$$

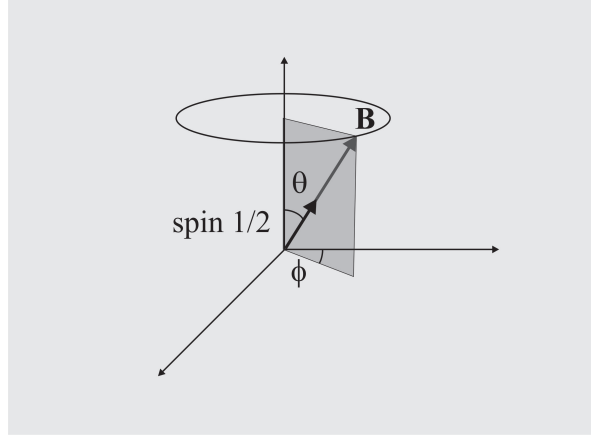


Figura 3: O campo magnético \mathbf{B} , parametrizado por (θ, ϕ) , orienta a direção do spin da partícula.

É importante notar que aqui o campo magnético, ao contrário do exemplo anterior, tem como função apenas mudar a orientação do spin da partícula. Uma maneira alternativa de escrever o Hamiltoniano é

$$H = -\mathcal{U}(\theta, \phi) \sigma^z \mathcal{U}^\dagger(\theta, \phi) \mu B = \mathcal{U}(\theta, \phi) H_0 \mathcal{U}^\dagger(\theta, \phi), \quad (2.4.3)$$

com $H_0 = -\mu B \sigma^z$, sendo que

$$\mathcal{U}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} & -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.4.4)$$

é uma rotação unitária do $SU(2)$ ⁴. Os autoestados do sistema, para uma orientação qualquer do campo magnético, são dados por

$$|\uparrow(\theta, \phi)\rangle = \mathcal{U}(\theta, \phi)|\uparrow\rangle \quad \text{e} \quad |\downarrow(\theta, \phi)\rangle = \mathcal{U}(\theta, \phi)|\downarrow\rangle,$$

com autovalores $E_\uparrow = -\mu B$ e $E_\downarrow = \mu B$, respectivamente, sendo que $\sigma^z|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$ e $\sigma^z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$. Consideramos agora que o sistema seja preparado no autoestado $|\uparrow(\theta_0, \phi_0)\rangle$. Caso a orientação do campo magnético seja mudada lentamente, o teorema adiabático garante que o sistema se adapta instantaneamente ao autoestado $|\uparrow(\theta, \phi)\rangle$. Quando o campo magnético retorna à sua orientação inicial, o mesmo ocorre com o

⁴O grupo especial unitário de grau n , ou $SU(n)$ é o grupo de matrizes $n \times n$ com determinante 1, cujas operações são as multiplicações de matrizes.

autoestado, a menos de um fator de fase global. A equação de Schrödinger determina que esse fator de fase seja dado por

$$e^{i\varphi} = \exp \left(\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \right) e^{iE_\uparrow T} \quad (2.4.5)$$

onde

$$A_\mu = \langle \uparrow | \mathcal{U}^\dagger(\theta, \phi) \frac{\partial}{\partial \lambda^\mu} \mathcal{U}(\theta, \phi) | \uparrow \rangle. \quad (2.4.6)$$

O vetor \mathbf{A} é chamado conexão de Berry e é análogo ao potencial vetor, com $\mu = 1, 2$, $\lambda^\mu = \{\theta, \phi\}$, C um caminho cíclico do espaço de parâmetros e T o tempo total da evolução. O primeiro termo na exponencial do lado direito, $\varphi_g = \frac{1}{i} \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$ é chamado de fase geométrica, já que depende apenas do caminho percorrido no espaço paramétrico $\{\theta, \phi\}$. Podemos avaliá-lo explicitamente lembrando que, da eq. (2.4.6),

$$A_\theta = \langle \uparrow | \mathcal{U}^\dagger(\theta, \phi) \frac{\partial}{\partial \theta} \mathcal{U}(\theta, \phi) | \uparrow \rangle = \langle \uparrow | \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix} | \uparrow \rangle = 0 \quad (2.4.7)$$

e

$$\begin{aligned} A_\phi &= \langle \uparrow | \mathcal{U}^\dagger(\theta, \phi) \frac{\partial}{\partial \phi} \mathcal{U}(\theta, \phi) | \uparrow \rangle = \frac{i}{2} \langle \uparrow | \begin{pmatrix} 1 - \cos \theta & -\sin \theta e^{-i\phi} \\ -\sin \theta e^{i\phi} & -1 + \cos \theta \end{pmatrix} | \uparrow \rangle \\ &= \frac{i}{2} (1 - \cos \theta). \end{aligned} \quad (2.4.8)$$

Podemos associar um campo efetivo, ou curvatura, às componentes da conexão de Berry \mathbf{A} , dado por

$$F_{\theta\phi} = \partial_\theta A_\phi - \partial_\phi A_\theta = \frac{i}{2} \sin \theta, \quad (2.4.9)$$

com $\partial_\theta = \partial/\partial\theta$, $\partial_\phi = \partial/\partial\phi$ e todas as outras componentes iguais a zero. Aplicando novamente o teorema de Stokes, temos que

$$\varphi_g = \frac{1}{i} \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{1}{i} \iint_{S(C)} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{s} = \frac{1}{2} \iint_{S(C)} d\theta d\phi \sin \theta = \frac{1}{2} \Omega(C) \quad (2.4.10)$$

onde C é o caminho percorrido no espaço paramétrico $\{\theta, \phi\}$, $S(C)$ é a superfície compreendida por C e $\Omega(C)$ é o ângulo sólido do caminho sobre a esfera percorrido pelo vetor $\hat{\mathbf{n}}(\theta, \phi)$, como na Figura 4.

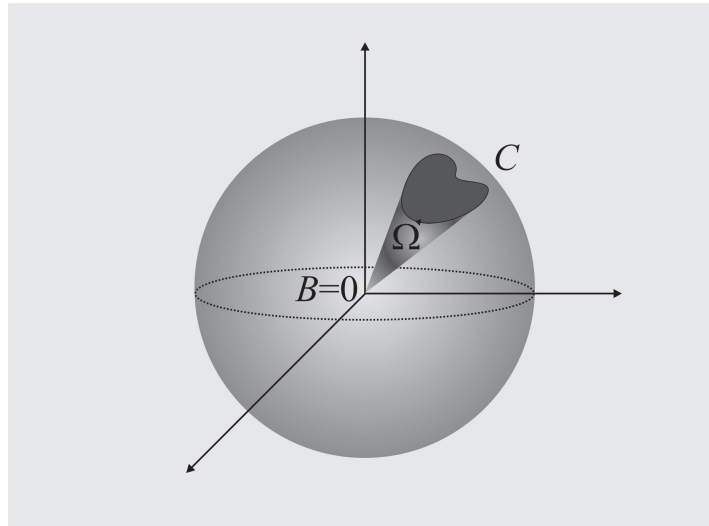


Figura 4: A fase geométrica φ_g adquirida pelo vetor de spin ao percorrer um circuito fechado no espaço de parâmetros $\{\theta, \phi\}$ é proporcional ao ângulo sólido Ω .

3 O Efeito Hall Quântico

3.1 Plateaus da Condutividade Transversal no Efeito Hall Quântico

O efeito Hall, descoberto por Edwin Hall em 1879, é o fenômeno de produção de uma voltagem transversal V_H em uma amostra metálica sujeita a uma corrente elétrica i em sentido longitudinal e um campo magnético \mathbf{B} perpendicular ao plano da amostra (ver Figura 5).

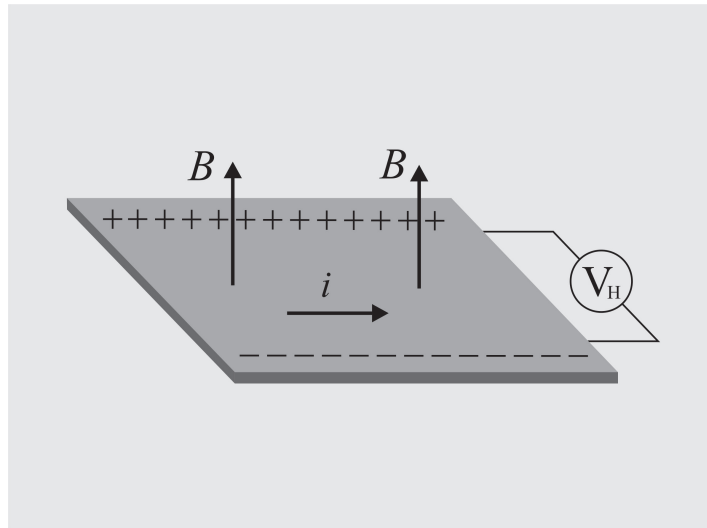


Figura 5: Diagrama da montagem experimental do efeito Hall.

Sua existência é prevista e explicada satisfatoriamente através da utilização da teoria eletromagnética clássica ⁵. Supondo a existência de portadores de carga negativa - os elétrons - é possível calcular facilmente a força de Lorentz experimentada por esses portadores devido ao campo magnético, o que resulta em um deslocamento dos portadores entre duas extremidades da amostra, o que gera uma diferença de potencial transversal, conhecida como a voltagem Hall V_H . A partir da voltagem Hall medida, pode-se calcular a intensidade do campo elétrico transversal, que está relacionada à condutividade através da densidade de corrente, ou seja $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$. O resultado obtido no experimento do efeito Hall clássico aponta para um comportamento linear da condutividade com a variação do campo magnético.

No entanto, em 1980, Klaus von Klitzing e colaboradores, em seu artigo “*New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance*” [2], apresentou resultados experimentais mostrando que, para temperaturas de hélio líquido (em torno de 4K) e campos magnéticos muito in-

⁵ Alguns dos resultados do efeito Hall são previstos pelo modelo de Drude de elétrons não interagentes em três dimensões espaciais.

tenso (da ordem de 15T) a condutividade Hall ⁶ medida em uma amostra MOSFET ⁷ apresenta valores quantizados (ver Figura 6), independentemente da geometria da amostra.

Além disso, a quantização ocorre em plateaus que são múltiplos inteiros de e^2/h , um resultado totalmente inesperado e não previsto teoricamente, o que serviu como base para estimar a constante de estrutura fina α ⁸.

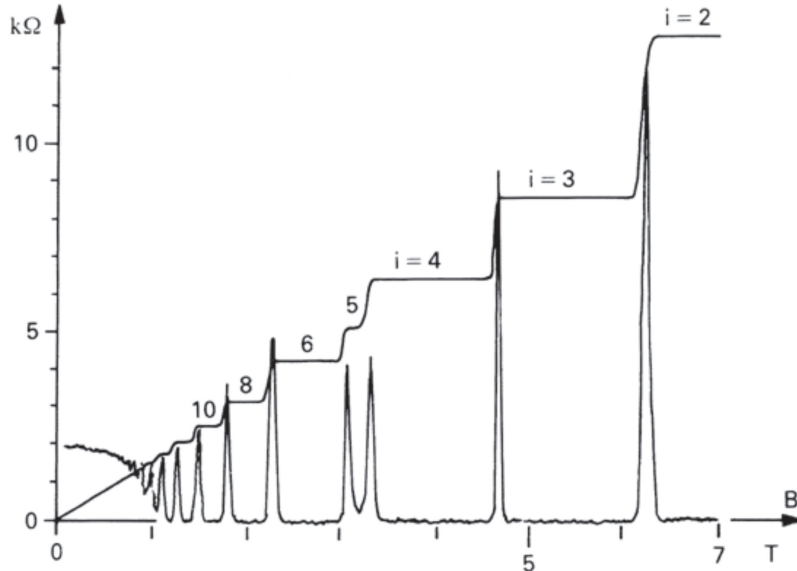


Figura 6: O resultado experimental obtido por von Klitzing para a resistência Hall (essencialmente a variável recíproca da condutividade) em função do campo magnético. Os plateaus são a resistência Hall quantizada em termos de e^2/h , enquanto os picos correspondem à resistência longitudinal (figura extraída de Chakraborty et al. [14]).

A primeira explicação teórica satisfatória para a quantização da condutividade Hall veio no artigo de Robert Laughlin [3] de 1981, em que ele apresentou um argumento intuitivo baseado no conceito de fases geométricas, já bem desenvolvido por outros teóricos, como Michael Berry. O *experimento mental de Laughlin*, como foi chamado, foi bem sucedido na explicação dos valores inteiros da quantização da condutividade Hall⁹.

⁶ Como o título do artigo acusa, von Klitzing mediu não a condutividade, mas a resistência. Porém, o resultado vale para as duas grandezas, que são inversamente proporcionais. Os gráficos apresentam o mesmo comportamento nos dois casos, quando plotados em função de \mathbf{B} ou de $1/\mathbf{B}$, respectivamente. Em 3 dimensões, a resistência e a resistividade estão relacionadas por $R = \rho(l/A)$, onde ρ é a resistividade, l o comprimento da amostra e A é a área da seção reta da amostra. Em geral [11], pode-se escrever $R = \rho L^{2-d}$, onde L é uma unidade de comprimento, e d é a dimensionalidade da amostra. Nota-se então que para uma amostra bidimensional, $2 - d = 0$, de modo que a resistência e a resistividade são equivalentes, o mesmo valendo para as grandezas recíprocas, a condutância e a condutividade. Nas seções 3.3 e 4.2 as derivações de resultados são feitas para a condutividade e a condutância, respectivamente, mas os termos devem ser encarados como intercambiáveis.

⁷ *Metal-oxide-semiconductor field-effect transistor*.

⁸ A constante de estrutura fina corresponde a $k_e e^2/\hbar c$ e é estimada em torno de $1/137$. 0360 0300(270), valor que pode ser obtido através do método de integrais de Feynman. A medida de von Klitzing permitiu, no entanto, que a obtenção desse valor ocorresse de forma bastante precisa e muito mais direta. Atualmente, seu valor foi estabelecido com precisão de até 8 casas decimais [12].

⁹ Robert Laughlin dividiu o prêmio Nobel de 1998 com Horst L. Störmer e Daniel C. Tsui pela explicação de outro fenômeno semelhante, o efeito Hall quântico fracionário, no qual a condutividade pode assumir valores fracionários bem definidos de e^2/h (ver seção 5).

Posteriormente, outros autores, como Thouless, Kohmoto, de Nijs e Nightingale [4] apresentaram derivações semelhantes utilizando a fórmula da resposta linear de Nakano-Kubo. As duas propostas serão apresentadas nas seções a seguir, após a introdução de conceitos relevantes ao entendimento do efeito Hall quântico.

3.2 Função de Onda de uma Partícula Carregada em um Campo Magnético

Considere-se um elétron sem spin, de carga e e massa m_e confinada em um filme fino de dimensões L_1 , L_2 e L_3 , conforme a Figura 7 [6].

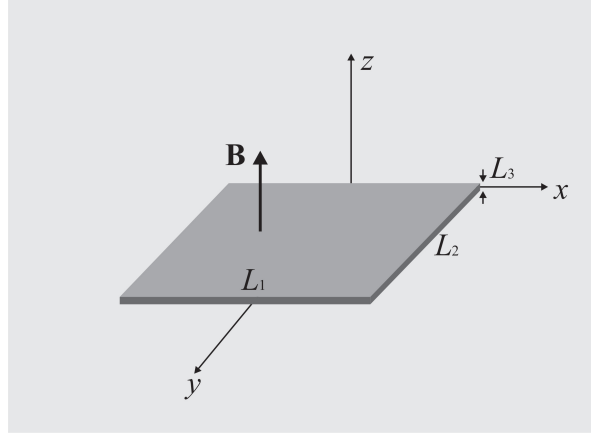


Figura 7: Um elétron é confinado a um filme fino, na presença de um campo magnético perpendicular.

Um campo magnético perpendicular ao plano é dado por $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$, que no gauge de Landau é descrito pelo potencial vetor como $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$. A equação de Schrödinger para esse sistema é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} + i\frac{eB}{\hbar}x \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \Psi = E\Psi. \quad (3.2.1)$$

Assumindo condições de contorno periódicas em y e z , a solução da equação de Schrödinger é dada por

$$\Psi(x, y, z) = \Phi(x)e^{ik_y y} e^{ik_z z}, \quad (3.2.2)$$

com $k_y = 2\pi p/L_2$, $k_z = 2\pi q/L_3$ e p e q inteiros. Excluindo a solução para y e z a equação de Schrödinger para a componente x pode ser reescrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(k_y + \frac{eB}{\hbar}x \right)^2 \Phi(x) = E'\Phi(x), \quad (3.2.3)$$

onde $E' = E - \hbar^2 k_z^2 / 2m_e$. Pode-se notar que a equação nessa forma é equivalente a de um oscilador harmônico simples unidimensional (OHS) com sua origem deslocada para $x_0 = -\hbar k_y / eB$, com constante elástica efetiva $\gamma_{ef} = e^2 B^2 / m_e$, e frequência angular $\omega = \sqrt{\gamma_{ef} / m_e}$, que corresponde à frequência de ciclotron do elétron confinado no plano e que também pode ser escrita como $\omega = eB / m_e$. Dessa forma, a solução pode ser reescrita como

$$\Psi(x, y, z) = \Psi_n^{\text{OHS}}(x - x_0) \sqrt{\frac{1}{L_2}} e^{ik_y y} \sqrt{\frac{1}{L_3}} e^{ik_z z}, \quad (3.2.4)$$

onde $\Psi_n^{\text{OHS}}(x - x_0)$ é o n -ésimo autoestado do oscilador harmônico e os níveis de energia são dados por

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2m_e} k_z^2, \quad (3.2.5)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$

Os estados correspondentes aos diferentes n são chamados *níveis de Landau*, e são parametrizados por valores discretos de k_y e k_z . Podemos agora inserir condições de contorno periódicas para x do tipo $-L_1/2 \leq x \leq L_1/2$. Como $\Psi_n^{\text{OHS}}(x - x_0)$ é definida para todo x tomamos a aproximação de que, para n pequeno, $|x_0| < L_1/2$, de modo que restringimos os possíveis valores de k_y para

$$|k_y| < \frac{eBL_1}{2\hbar}. \quad (3.2.6)$$

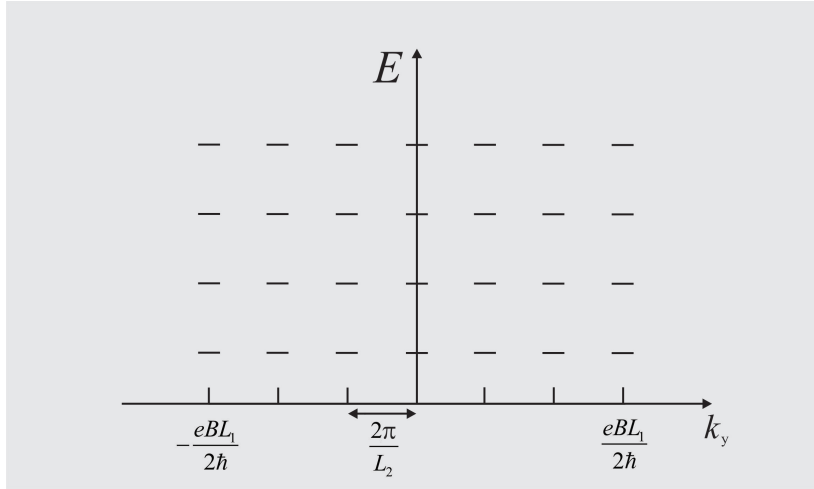


Figura 8: Os níveis de Landau possuem grande degenerescência para diferentes valores do vetor de onda k_y .

Considerando ainda que o espaçamento entre os números de onda k_y é dado por $2\pi/L_2$, concluímos que para um dado nível de Landau E existe uma degenerescência associada aos possíveis valores de k_y , de modo que muitos elétrons podem ser acomodados em um nível com a mesma energia (ver Figura 8). O número de estados permitidos em cada nível de Landau pode ser calculado considerando o “comprimento” máximo permitido para k_y dividido pelo separação entre cada um desses estados, $2\pi/L_2$:

$$N_y = 2 \frac{eB}{\hbar} \frac{L_1}{2} \frac{1}{2\pi/L_2} = \frac{L_1 L_2}{2\pi l_B^2}, \quad (3.2.7)$$

onde $L_1 L_2$ é a área da amostra e $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ é chamado comprimento magnético. O espaçamento entre os níveis de Landau é dado, portanto, por

$$\Delta E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2}{m_e l_B^2}. \quad (3.2.8)$$

3.3 A Quantização da Condutividade Hall

Trataremos agora de uma amostra metálica bidimensional mantida a baixas temperaturas, localizada no plano $x - y$, sujeita a um campo magnético perpendicular $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ e um campo elétrico $\mathbf{E} = (0, E_y, 0)$, conforme a Figura 9. Com o campo elétrico na direção y , tem-se que a densidade de corrente é dada por

$$j_y = \sigma_0 E_y, \quad (3.3.1)$$

com σ_0 sendo a condutividade elétrica [1], escrita como

$$\sigma_0 = \frac{n_e e^2 \tau_0}{m_e^*}, \quad (3.3.2)$$

onde τ_0 é o tempo entre colisões com impurezas, também chamado tempo de relaxação, e m_e^* é a massa efetiva do elétron no material.

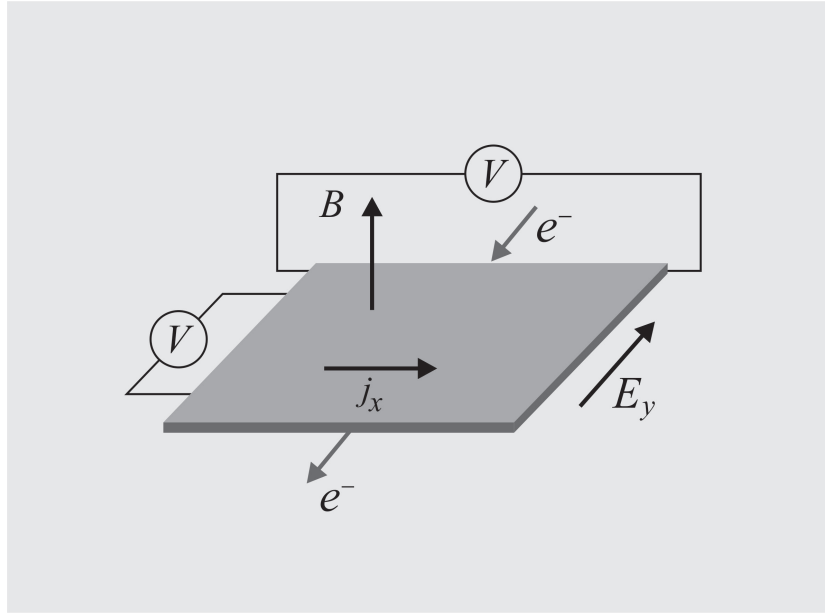


Figura 9: Esquema da montagem experimental do efeito Hall; uma amostra metálica bidimensional sujeita a um campo elétrico longitudinal e um campo magnético perpendicular.

Na presença de um campo magnético perpendicular, os elétrons experimentam uma força de Lorentz dada por $\mathbf{F}_L = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$. Sabendo ainda que a densidade de corrente pode ser escrita como $\mathbf{j} = -en_e\mathbf{v}$, na presença dos campos elétrico e magnético, temos que

$$\mathbf{j} = \sigma_0 \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{j} \times \mathbf{B}}{n_e e} \right), \quad (3.3.3)$$

sendo que a densidade de elétrons n_e é escrita usando a eq. (3.2.7),

$$n_e = f \frac{N_y}{L_1 L_2} = f \frac{eB}{h}, \quad (3.3.4)$$

onde f é uma constante a ser determinada. Podemos, usando essas relações, escrever as componentes longitudinal e transversal da condutividade ¹⁰, o que resulta em:

$$\sigma_{yy} = \frac{j_y}{E_y} = \frac{n_e e^2 \tau_0 / m_e^*}{1 + (e\tau_0 B / m_e^*)^2}; \quad \sigma_{xy} = \frac{j_x}{E_y} = f \frac{e^2}{h} \left[1 - \frac{1}{1 + (e\tau_0 B / m_e^*)^2} \right] \quad (3.3.5)$$

Fica evidente que, na ausência de campo magnético, recuperamos os resultados clássicos $\sigma_{yy} = \sigma_0$ e $\sigma_{xy} = 0$. Agora, como vimos anteriormente, a descoberta de von Klitzing mostrou que, para B variável, f é um inteiro, e as condutividades ficam representadas por

$$\sigma_{yy} = 0; \quad \sigma_{xy} = f \frac{e^2}{h}, \quad (3.3.6)$$

valores observados quando a energia de Fermi E_F encontra-se entre dois níveis de Landau. A variação do campo magnético, por sua vez, faz com que E_F passe pelos níveis de Landau¹¹; enquanto isso ocorre, tem-se que a condutividade Hall σ_{xy} salta entre dois plateaus, enquanto a condutividade longitudinal σ_{yy} tende a um máximo e depois novamente a zero (ver Figura 6). Porém, a eq. (3.3.5) não aponta para um comportamento quantizado de σ_{xy} com a variação de B .

Qualitativamente [6], os resultados da eq. (3.3.6) podem ser obtidos dos valores de condutividade da eq. (3.3.5) considerando que, numa amostra metálica mantida a baixas temperaturas, os elétrons devem preencher os níveis de Landau um por um, não podendo transitar entre níveis vizinhos devido ao fato de serem férmions e não poderem ocupar o mesmo estado ¹². Como mostramos anteriormente, o tempo de relaxação do sistema, ou tempo entre colisões com impurezas é dado por τ_0 . Com a amostra mantida a baixas temperaturas, dois efeitos devem ser considerados: primeiro, as colisões elásticas com impurezas, que poderiam fazer um elétron saltar para outro estado de mesma energia, não devem ocorrer, já que todos os estados vizinhos devem estar já preenchidos. Segundo, as flutuações térmicas que permitiriam que um elétron mudasse para um estado de mais alta energia são inibidas, já que em temperaturas próximas de 0 K pouca energia térmica é fornecida ao sistema (ver Figura 10). Assim, pode-se efetivamente interpretar que o tempo entre colisões de elétrons com impurezas tende a infinito nesse regime, ou seja $\tau_0 \rightarrow \infty$. Substituindo esse resultado na eq. (3.3.5), obtemos diretamente $\sigma_{yy} = 0$ e $\sigma_{xy} = f(e^2/h)$, os resultados desejados. É necessário perceber, porém, que esse argumento qualitativo não dá conta de explicar a

¹⁰Em duas dimensões, a condutividade e a resistividade são representadas pelos tensores [14] $\hat{\sigma}$ e $\hat{\rho}$, sendo que $\hat{\rho} = (\hat{\sigma})^{-1}$:

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{yy} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}, \quad \hat{\rho} = \frac{1}{\sigma_{yy}^2 + \sigma_{xy}^2} \begin{pmatrix} \sigma_{yy} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}.$$

¹¹É importante notar que aqui os níveis de Landau são estendidos, e ocupam uma banda de largura finita em função da presença de impurezas na amostra.

¹²Não estamos considerando aqui o spin do elétron, de modo que não colocamos dois elétrons de spins opostos em um mesmo nível. Porém, o argumento pode também ser estendido para esse caso, e podemos afirmar que o princípio da exclusão de Pauli se aplica nesse caso.

exata quantização dos *plateaus* de σ_{xy} . Os valores inteiros obtidos experimentalmente para a constante f estão relacionados a uma característica mais profunda do sistema, que envolve as fases geométricas e a invariância de *gauge*.

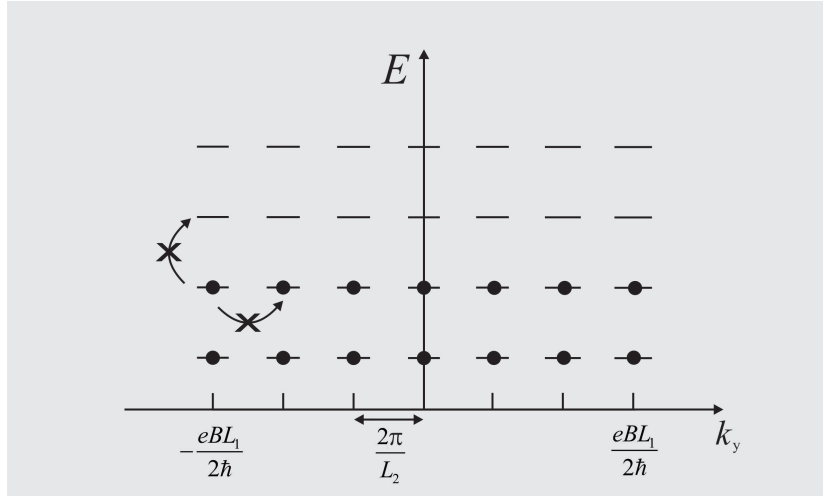


Figura 10: Os elétrons não podem ocupar estados vizinhos devido ao princípio da exclusão de Pauli, e não podem saltar para estados de mais alta energia devido à baixa temperatura da amostra.

3.4 O Argumento de Laughlin

A primeira explicação para a quantização da condutividade Hall em *plateaus* de números inteiros surgiu através do experimento mental de Laughlin [3], publicado em 1981, onde o efeito Hall quântico é tratado através do conceito de fases geométricas, introduzido na seção 2.2. A questão principal a respeito do argumento de Laughlin é notar que, uma vez que a condutividade Hall não depende da geometria da amostra ou da presença de impurezas, ela deve estar relacionada a alguma propriedade não-microscópica do sistema. Consideramos então a amostra metálica bidimensional da seção 3.3, exceto que agora suas extremidades longitudinais estarão unidas, de modo que a superfície bidimensional da placa Hall configura um cilindro, como na Figura 11. Nessa figura, as duas bordas transversais do cilindro metálico estão ligadas a reservatórios de elétrons, denominados R_A e R_B . Um campo magnético B é perpendicular à superfície da amostra em todos os pontos. A variação temporal de um fluxo magnético Φ que atravessasse o cilindro - como indicado na figura - deve gerar uma corrente ao longo de sua superfície, devido à lei da indução de Faraday [13].

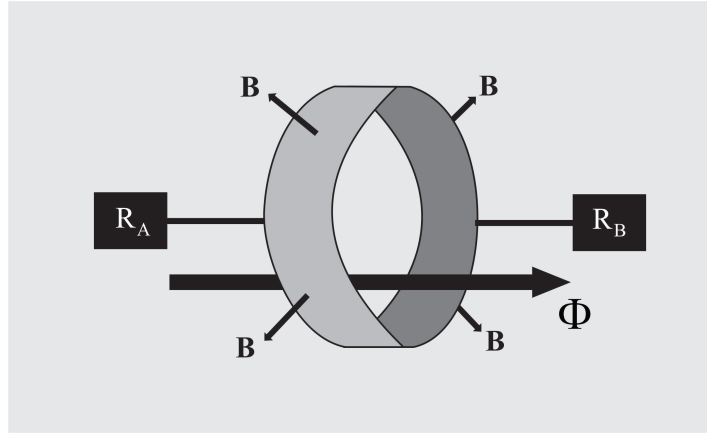


Figura 11: A amostra cilíndrica bidimensional está sujeita a um campo magnético perpendicular. Ao mesmo tempo, um fluxo magnético Φ atravessa o cilindro, gerando uma corrente longitudinal na placa que, ao interagir com o campo magnético, realiza transferência de elétrons entre os reservatórios R_A e R_B .

Um aumento do fluxo Φ em um múltiplo inteiro do fluxo unitário,

$$\Phi_0 = \frac{hc}{e} \quad (3.4.1)$$

corresponde a uma transformação de *gauge*, que leva o sistema quântico ao seu estado original, a menos de uma fase geométrica, como pode-se perceber da equação (2.2.4). Esta fase geométrica tem propriedades topológicas, o que explica por que a condutividade Hall toma valores discretos. A mudança de fluxo corresponde a um campo elétrico ao longo do cilindro, que interage com o campo magnético B perpendicular à superfície, gerando uma força de Lorentz transversal ao campo elétrico e, como consequência, uma transferência de carga entre os reservatórios R_A e R_B . A transferência de carga é dada por

$$Q = \sigma_{xy} \frac{h}{e}, \quad (3.4.2)$$

onde $\sigma_{xy} = fe^2/h$, onde f é um parâmetro desconhecido, como na eq. (3.3.6). Classicamente, espera-se que a carga transferida entre os reservatórios A e B durante o aumento do fluxo Φ seja um múltiplo inteiro de e . Quanticamente, porém, os valores observados experimentalmente correspondem a médias de operadores. Mostraremos nessa seção que a condutividade e , por extensão, a carga transferida são de fato valores quantizados. É necessário, para isso, analisar o valor esperado para o operador de corrente J com a alteração do fluxo. Consideramos nesse caso a evolução adiabática em que deformamos as condições de contorno da amostra bidimensional da seguinte forma (ver Figura 12): primeiro tomamos a amostra no plano $x - y$ e a transformamos, adiabaticamente, em um cilindro em torno do eixo x , introduzindo em seguida um fluxo Φ_x . Retornamos então à configuração inicial do sistema e deformamos o plano em um cilindro na direção y , introduzindo o fluxo Φ_y ao fim do processo. Finalmente, retornamos mais uma vez à configuração plana inicial.

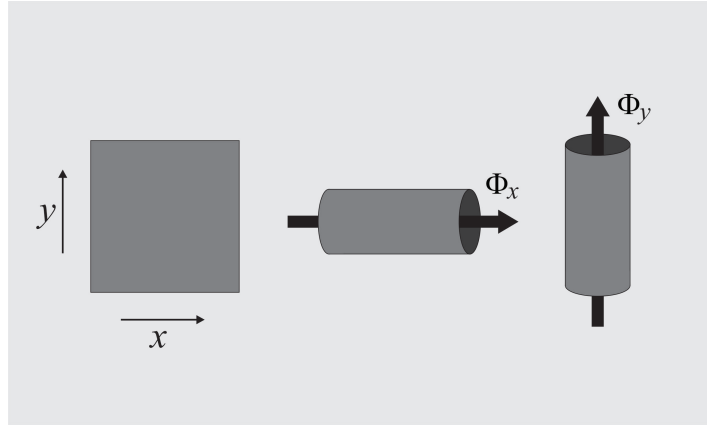


Figura 12: A amostra bidimensional plana é deformada adiabaticamente em uma amostra cilíndrica em x e y , sendo atravessada por fluxos Φ_x e Φ_y nas respectivas direções, antes de retornar à configuração inicial.

O Hamiltoniano do sistema é agora parametrizado pelos fluxos Φ_x e Φ_y , ou seja, $H = H(\Phi_x, \Phi_y)$. Como o Hamiltoniano é invariante frente a um aumento de fluxo de Φ_0 , podemos considerá-lo periódico tanto em Φ_x quanto em Φ_y . Supondo que o sistema seja preparado em seu estado fundamental $|\Psi(\Phi_x, \Phi_y)\rangle$, as transformações adiabáticas de deformação da amostra e implementação dos fluxos não alteram sua energia, que chamaremos E_0 . A alteração nos fluxos, porém, induz correntes na amostra, que podem ser representadas pelos seguintes operadores:

$$J_x = c \frac{\partial H}{\partial \Phi_x}, \quad J_y = c \frac{\partial H}{\partial \Phi_y}. \quad (3.4.3)$$

Vamos considerar o caso particular em que os fluxos Φ_x e Φ_y são aumentados de Φ_0 , após as respectivas deformações adiabáticas da amostra. Devido à invariância de *gauge*, o estado final do sistema deve ser o mesmo a menos de uma fase geométrica global φ_g , de modo que

$$|\Psi(\Phi_x + \Phi_0, \Phi_y + \Phi_0)\rangle = e^{i\varphi_g} |\Psi(\Phi_x, \Phi_y)\rangle. \quad (3.4.4)$$

É importante agora que possamos avaliar o valor de φ_g frente a essas variações de fluxo. Para isso, tomamos a eq. de Schrödinger quando apenas o fluxo Φ_y é aumentado:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = i\hbar \frac{\partial \Phi_y}{\partial t} \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_y} \right\rangle = H |\Psi\rangle. \quad (3.4.5)$$

Multiplicando por $\langle \partial \Psi / \partial \Phi_x |$, obtemos

$$i\hbar \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \left| \frac{\partial \Phi_y}{\partial t} \right| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_y} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \left| H \right| \Psi \right\rangle. \quad (3.4.6)$$

Tomando o complexo conjugado dessa expressão e somando-as, temos

$$i\hbar \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \left| \frac{\partial \Phi_y}{\partial t} \right| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_y} \right\rangle - i\hbar \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_y} \left| \frac{\partial \Phi_y}{\partial t} \right| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \left| H \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| H \right| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \right\rangle, \quad (3.4.7)$$

e, reagrupando os termos (notando que $iZ - iZ^* = -2\text{Im}Z$, onde Z é um número complexo),

$$-2\hbar \frac{\partial \Phi_y}{\partial t} \text{Im} \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_y} \right. \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \left| H \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| H \right| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \right\rangle. \quad (3.4.8)$$

Como H é hermitiano, podemos supor que opera tanto à direita quanto à esquerda, sendo que podemos reescrever a derivada parcial com relação ao fluxo Φ_x :

$$\frac{\partial}{\partial \Phi_x} \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \left| H \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| \frac{\partial H}{\partial \Phi_x} \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| H \right| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \right\rangle. \quad (3.4.9)$$

Porém, como vimos, a energia do estado fundamental deve permanecer a mesma durante a variação dos fluxos, então podemos escrever:

$$\frac{\partial}{\partial \Phi_x} \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \frac{\partial}{\partial \Phi_x} E_0 \langle \Psi | \Psi \rangle = \frac{\partial E_0}{\partial \Phi_x} = 0. \quad (3.4.10)$$

Ou seja,

$$\left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \left| H \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| \frac{\partial H}{\partial \Phi_x} \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| H \right| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \right\rangle = 0, \quad (3.4.11)$$

e, finalmente,

$$\left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \left| H \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| H \right| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \right\rangle = - \left\langle \Psi \left| \frac{\partial H}{\partial \Phi_x} \right| \Psi \right\rangle. \quad (3.4.12)$$

Utilizando agora a definição da eq. (3.4.3), reescrevemos

$$\left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \left| H \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| H \right| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \right\rangle = -\frac{1}{c} \langle \Psi | J_x | \Psi \rangle, \quad (3.4.13)$$

e substituímos na eq. (3.4.8), obtendo

$$\langle \Psi | J_x | \Psi \rangle = c\hbar \frac{\partial \Phi_y}{\partial t} K(\Phi_x, \Phi_y), \quad (3.4.14)$$

onde

$$K(\Phi_x, \Phi_y) = 2 \text{Im} \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_y} \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \right. \right\rangle \quad (3.4.15)$$

é chamada de *curvatura adiabática* [12]. Na eq. (3.4.14), podemos notar que $(\partial \Phi_y / \partial t) / c$ é a força eletromotriz¹³ associada à corrente Hall $\langle \Psi | J_x | \Psi \rangle$, com fator de proporcionalidade $\hbar c^2 K(\Phi_x, \Phi_y)$. Podemos então escrever:

$$\langle \Psi | J_x | \Psi \rangle = [\hbar c^2 K(\Phi_x, \Phi_y)] \epsilon, \quad (3.4.16)$$

¹³Da lei da indução de Faraday [13],

$$\epsilon = -\frac{1}{c} \frac{d\Phi_B}{dt},$$

ϵ é a força eletromotriz gerada pela variação temporal do fluxo magnético Φ_B .

onde o fator de proporcionalidade entre colchetes pode ser identificado como a condutividade Hall σ_{xy} . De maneira análoga à seção 2.4, podemos introduzir a conexão de Berry com respeito aos parâmetros $\{\Phi_x, \Phi_y\}$:

$$A_{\Phi_x} = \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \right. \right\rangle, \quad A_{\Phi_y} = \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_y} \right. \right\rangle. \quad (3.4.17)$$

Os elementos não-nulos do vetor de campo efetivo, ou da curvatura, são dados por:

$$F_{\Phi_x \Phi_y} = \frac{\partial A_{\Phi_y}}{\partial \Phi_x} - \frac{\partial A_{\Phi_x}}{\partial \Phi_y}, \quad (3.4.18)$$

que, pelos mesmos argumentos usados em (3.4.15), podem ser reescritos como

$$F_{\Phi_x \Phi_y} = 2i \operatorname{Im} \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_y} \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \Phi_x} \right. \right\rangle. \quad (3.4.19)$$

Portanto, é possível escrever a condutividade Hall do sistema em termos da curvatura do espaço de Hilbert parametrizada pelos fluxos $\{\Phi_x, \Phi_y\}$:

$$\sigma_{xy}(\Phi_x, \Phi_y) = \hbar c^2 K(\Phi_x, \Phi_y) = -i\hbar c^2 F_{\Phi_x \Phi_y}. \quad (3.4.20)$$

Da equação (2.4.10), relacionamos a curvatura \mathbf{F} com a fase geométrica φ_g de acordo com

$$\varphi_g = \frac{1}{i} \iint_{S(C)} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{s}. \quad (3.4.21)$$

Portanto, a condutividade *total* é proporcional à fase geométrica resultante da evolução adiabática do crescimento dos fluxos Φ_x e Φ_y , de 0 a Φ_0 . No caso particular do espaço de Hilbert parametrizado pelos fluxos, temos que a fase geométrica será escrita em termos da curvatura como

$$\varphi_g = \iint_{\Sigma} K(\Phi_x, \Phi_y) d\Phi_x d\Phi_y, \quad (3.4.22)$$

onde a superfície Σ deve ser identificada como um toróide, uma vez que $K(\Phi_x, \Phi_y)$ é periódica tanto em Φ_x quanto em Φ_y , com período Φ_0 . Para encontrar a carga total transferida entre os reservatórios R_A e R_B , é necessário integrar sobre toda a superfície Σ ; assim, a condutividade total será proporcional a

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \iint_{\Sigma} K(\Phi_x, \Phi_y) d\Phi_x d\Phi_y, \quad (3.4.23)$$

onde ν é chamado *número de Chern*. A eq. (3.4.23) guarda notável semelhança com a fórmula de Gauss-Bonnet [12] para invariantes topológicos:

$$\frac{1}{2\pi} \iint_S \kappa ds = 2(1 - g), \quad (3.4.24)$$

onde integra-se a curvatura local κ sobre uma superfície compacta S e o lado direito da equação é um número inteiro, uma vez que g (conhecido como o *geno* de uma variedade topológica) conta o número de alças, ou buracos, de uma determinada forma

geométrica¹⁴. Ocorre que a fórmula de Gauss-Bonnet aplica-se não apenas para a curvatura de variedades geométricas, mas também para a curvatura adiabática ¹⁵ da eq. (3.4.15) no espaço do Hilbert. Nesse caso, como o lado direito da eq. (3.4.24) ainda é um inteiro (não necessariamente relacionado ao geno da superfície Σ), então σ_{xy} - a condutividade Hall - deve ser quantizada, assim como a carga transferida entre os reservatórios, de acordo com a eq. (3.4.2). A interpretação física para esse fenômeno consiste no fato de que o sistema deve ser invariante frente a pequenas perturbações no Hamiltoniano, tal qual uma forma geométrica pode ser deformada em outra, desde que elas pertençam a uma mesma classe topológica. Nesse regime, a condutividade Hall não deve variar em função da variação do campo magnético nem de uma desordem perturbacional no sistema, o que explica a existência dos *plateaus* no gráfico de σ_{xy} (ver Figura 6). Quando a variação do campo magnético é grande o suficiente, a perturbação do Hamiltoniano será tal que o ganho de fase do sistema fará com que ele salte para outro estado. Nessa situação, observa-se a transição entre dois *plateaus* de σ_{xy} .

¹⁴De modo geral, a topologia estuda as formas geométricas que podem ser continuamente deformadas umas nas outras, sem alterar o valor de g . Para uma esfera, por exemplo, $g = 0$, enquanto que, para um toróide, $g = 1$, e essas formas não podem ser continuamente transformadas uma na outra.

¹⁵A generalização dessa fórmula para estados quânticos se deve a Shiing-Shen Chern, e é chamada fórmula de Gauss-Bonnet-Chern [12].

4 Invariantes Topológicos no Efeito Hall Quântico

Nesta seção será mostrado como se pode ter o mesmo resultado obtido com o argumento de Laughlin, tendo como base um modelo de elétrons em um potencial periódico bidimensional sujeito a um campo magnético transversal [5]. Veremos que a condutância¹⁶ Hall assume valores inteiros em unidades de e^2/h , desde que a energia de Fermi se encontre em um gap entre os níveis de Landau.

4.1 Elétrons de Bloch num Campo Magnético

Supondo um modelo de elétrons num campo magnético e na presença de um potencial periódico, a equação de Schrödinger é escrita

$$H\Psi = \left[\frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + U(x, y) \right] \Psi = e\Psi, \quad (4.1.1)$$

com $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ e \mathbf{A} no plano $x - y$. O potencial periódico é descrito por $U(x + a, y) = U(x, y + b) = U(x, y)$. Naturalmente, o sistema é invariante frente a translações de a em x e b em y . Isso equivale a definir um vetor da rede de Bravais $\mathbf{R} = n\mathbf{a} + m\mathbf{b}$, com n e m inteiros. A cada vetor \mathbf{R} da rede podemos associar um operador de translação T_R , tal que $T_R f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, ou seja

$$T_R = \exp\{(i/\hbar)\mathbf{R} \cdot \mathbf{p}\}. \quad (4.1.2)$$

É possível notar que $U(\mathbf{r})$ permanece invariante sob a atuação de T_R , o que não ocorre para $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, pois, em geral, $\mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \neq \mathbf{A}(\mathbf{r})$. Em outras palavras, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ e $\mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ diferem pelo gradiente de uma função escalar:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) + \nabla g(\mathbf{r}). \quad (4.1.3)$$

Tomamos agora os operadores de translações magnéticas

$$\hat{T}_R = \exp\{(i/\hbar)\mathbf{R} \cdot [\mathbf{p} + e(\mathbf{r} \times \mathbf{B})/2]\}, \quad (4.1.4)$$

ou

$$\hat{T}_R = T_R \exp\{(ie/\hbar)(\mathbf{B} \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{r}/2\}. \quad (4.1.5)$$

Escolhendo o *gauge* simétrico $\mathbf{A} = (\mathbf{B} \times \mathbf{r})/2$, o Hamiltoniano permanece invariante frente à atuação dos operadores de translações magnéticas, ou seja

$$\left[\hat{T}_R, H \right] = 0. \quad (4.1.6)$$

¹⁶Esta seção é baseada no artigo de Mahito Kohmoto “Topological Invariant and the Quantization of the Hall Conductance” [5]. Embora a derivação seja feita para a condutância, para uma amostra bidimensional, como foi demonstrado, essa grandeza é equivalente à condutividade. Boa parte do desenvolvimento teórico segue as noções básicas desenvolvidas por Douglas Hofstadter em seu modelo teórico de 1976 [15]. O modelo trata de um gás bidimensional de elétrons não-interagentes em um potencial periódico. O diagrama de fase do modelo a temperatura zero considera variáveis como o campo magnético e o potencial químico. O resultado apresenta uma estrutura fractal, em que cada cor representa uma fase quântica associada a um invariante topológico. Esse gráfico é também conhecido como *borboleta de Hofstadter* [16].

É necessário perceber que, em geral, as translações magnéticas não comutam. Portanto

$$\hat{T}_a \hat{T}_b = \exp(2\pi i \phi) \hat{T}_a \hat{T}_b, \quad (4.1.7)$$

onde $\phi = (eB/h)ab$ é o número de fluxos magnéticos na célula unitária. Se ϕ é um número racional, então podemos escrever $\phi = p/q$ (onde p e q são primos relativos) e teremos um subconjunto de translações que comutam umas com as outras. Podemos agora tomar uma célula através da qual passa um número inteiro de fluxos magnéticos. Reescrevendo o vetor da rede de Bravais como

$$\mathbf{R}' = n(q\mathbf{a}) + m\mathbf{b}, \quad (4.1.8)$$

então p quanta de fluxo magnético passam na célula unitária, e os operadores de translações referentes aos novos vetores da rede de Bravais, $\hat{T}_{R'}$, comutam. Os autovalores de \hat{T}_{qa} e \hat{T}_b serão

$$\hat{T}_{qa}\psi = e^{ik_1qa}\psi \quad (4.1.9)$$

$$\hat{T}_b\psi = e^{ik_2b}\psi, \quad (4.1.10)$$

onde k_1 e k_2 são chamados momentos cristalinos generalizados e estão definidos na zona de Brillouin magnética: $0 \leq k_1 \leq 2\pi/qa$ e $0 \leq k_2 \leq 2\pi/b$. As autofunções ψ são do tipo ondas de Bloch

$$\psi_{k_1k_2}^\alpha(x, y) = e^{ik_1x + ik_2y} u_{k_1k_2}^\alpha(x, y), \quad (4.1.11)$$

e são rotuladas tanto por k_1 e k_2 , bem como pelo índice de banda α . As funções de Bloch são transladadas de acordo com

$$u_{k_1k_2}^\alpha(x + a, y) = e^{-i\pi y/b} u_{k_1k_2}^\alpha(x, y), \quad (4.1.12)$$

$$u_{k_1k_2}^\alpha(x, y + b) = e^{i\pi px/qa} u_{k_1k_2}^\alpha(x, y). \quad (4.1.13)$$

É possível notar que, ao contornar completamente a célula unitária, a função de onda receberá uma fase igual a $2\pi p$. Se reescrevermos a função de onda de Bloch com a inclusão de uma fase arbitrária

$$u_{k_1k_2}(x, y) = |u_{k_1k_2}(x, y)| \exp[i\theta_{k_1k_2}(x, y)], \quad (4.1.14)$$

então

$$p = -\frac{1}{2\pi} \int d\mathbf{l} \cdot \frac{d\theta_{k_1k_2}(x, y)}{d\mathbf{l}} \quad (4.1.15)$$

onde $d\mathbf{l}$ corresponde ao caminho em sentido anti-horário no contorno da célula unitária magnética. Como mostramos, p é um valor inteiro, e nesse caso representa o número de voltas que uma seta daria em torno de si mesma ao percorrer a borda da célula. Agora, se a seta contornar um zero da função de onda, assume-se que ela percorre um pequeno círculo em torno de uma singularidade, girando uma vez em torno de si mesma no processo. Dessa forma, um zero da função de onda pode ser encarado como tendo

vorticidade igual a +1 ou -1, de acordo com o sentido da rotação da seta. O ganho de fase ao circular uma singularidade será importante quando levarmos em consideração a interação de um elétron com o potencial vetor \mathbf{A} na próxima seção.

4.2 Resposta Linear e Fórmula de Nakano-Kubo

Analizamos agora o caso de elétrons em um potencial periódico na presença de um campo magnético perpendicular. Retomando as funções de Bloch da seção anterior, escrevemos a equação de Schrödinger

$$\hat{H}(k_1, k_2)u_{k_1 k_2}^\alpha = E^\alpha u_{k_1 k_2}^\alpha, \quad (4.2.1)$$

com

$$\hat{H}(k_1, k_2) = \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A})^2 + U(x, y). \quad (4.2.2)$$

Quando um campo elétrico fraco é aplicado ao sistema, a condutância transversal é representada pela fórmula de Nakano-Kubo [14], que expressa a resposta linear de um observável em razão de uma perturbação (ver Apêndice II):

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2 \hbar}{i} \sum_{E^\alpha < E_F < E^\beta} \frac{(v_y)_{\alpha\beta}(v_x)_{\beta\alpha} - (v_x)_{\alpha\beta}(v_y)_{\beta\alpha}}{(E^\alpha - E^\beta)^2} \quad (4.2.3)$$

onde os $v_{\alpha\beta}$ são os elementos de matriz do operador velocidade $\hat{v} = (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})/m$ entre duas bandas acima e abaixo do nível de Fermi. Para obter os elementos desse operador, escrevemos

$$\hat{v}_{\alpha\beta} = \delta_{k_1 k_1'} \delta_{k_2 k_2'} \int_0^{qa} dx \int_0^b dy u_{k_1 k_2}^\alpha \hat{v} u_{k_1' k_2'}^\beta, \quad (4.2.4)$$

mas eles podem ser reescritos como as derivadas parciais do Hamiltoniano dependente de \mathbf{k} , ou seja:

$$(v_x)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar} \left\langle \alpha \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial k_1} \right| \beta \right\rangle \quad ; \quad (v_y)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar} \left\langle \alpha \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial k_2} \right| \beta \right\rangle \quad (4.2.5)$$

Os elementos de matriz das derivadas parciais de \hat{H} são escritos:

$$\left\langle \alpha \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial k_j} \right| \beta \right\rangle = (E^\beta - E^\alpha) \left\langle \alpha \left| \frac{\partial u^\beta}{\partial k_j} \right\rangle = (E^\beta - E^\alpha) \left\langle \frac{\partial u^\alpha}{\partial k_j} \right| \beta \right\rangle, \quad (4.2.6)$$

com $j = 1, 2$. Dessa forma, pode-se reescrever a fórmula da resposta linear como

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{i\hbar} \sum_{E^\alpha < E_F < E^\beta} \left(\left\langle \frac{\partial u^\alpha}{\partial k_2} \right| \beta \right\rangle \left\langle \beta \left| \frac{\partial u^\alpha}{\partial k_1} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u^\alpha}{\partial k_1} \right| \beta \right\rangle \left\langle \beta \left| \frac{\partial u^\alpha}{\partial k_2} \right\rangle \right). \quad (4.2.7)$$

Da relação de clausura, temos que $\sum_{E^\alpha < E_F < E^\beta} |\alpha\rangle\langle\alpha| + |\beta\rangle\langle\beta| = 1$, o que fornece

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \int d^2 k \int d^2 r \left(\frac{\partial u_{k_1 k_2}^*}{\partial k_2} \frac{\partial u_{k_1 k_2}}{\partial k_1} - \frac{\partial u_{k_1 k_2}^*}{\partial k_1} \frac{\partial u_{k_1 k_2}}{\partial k_2} \right) \quad (4.2.8)$$

Agora, como vimos na eq. (2.4.6), podemos definir um campo vetorial na zona de Brillouin magnética:

$$\mathbf{A}(k_1, k_2) = \int d^2r u_{k_1 k_2}^* \nabla_k u_{k_1 k_2} = \langle u_{k_1 k_2} | \nabla_k | u_{k_1 k_2} \rangle. \quad (4.2.9)$$

Os índices de banda α podem ser omitidos das funções de onda, já que a partir de agora consideraremos contribuições de uma única banda. Com isso, podemos reescrever a equação da condutância substituindo a integral em d^2r pela terceira componente do rotacional de \mathbf{A} , ou seja

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \int d^2k [\nabla_k \times \mathbf{A}(k_1, k_2)]_3, \quad (4.2.10)$$

onde a integral se dá sobre toda a zona de Brillouin magnética, como foi mostrado: $0 \leq k_1 \leq 2\pi/qa$ e $0 \leq k_2 \leq 2\pi/b$. Aqui é importante notar que a zona de Brillouin magnética é periódica tanto em k_1 quanto k_2 , de modo que os pontos $(0, 2\pi/qa)$ e $(0, 2\pi/b)$ são os mesmos. Isso equivale a dizer que a zona de Brillouin magnética está disposta como uma superfície toroidal T^2 . Agora, se aplicarmos o teorema de Stokes [9] à eq. (4.2.10), teremos que $\sigma_{xy} = 0$ se \mathbf{A} for bem definido em todo T^2 , pois o toróide não possui limites em qualquer direção. Assim, um valor de σ_{xy} diferente de zero só é possível se considerarmos um campo vetorial que contenha alguma singularidade e seja, portanto, topologicamente não-trivial. Cabe notar que se fizermos a transformação de *gauge*

$$\mathbf{A}'(k_1, k_2) = \mathbf{A}(k_1, k_2) + i\nabla_k f(k_1, k_2), \quad (4.2.11)$$

adicionando o gradiente de uma função escalar $f(k_1, k_2)$ ao campo vetorial, σ_{xy} permanece invariante. A topologia não-trivial ocorre caso a fase $\nabla_k f(k_1, k_2)$ não possa ser univocamente definida em toda a zona de Brillouin magnética. Para tanto, é necessário considerar a existência de zeros da função de onda. Se $|u_{k_1 k_2}\rangle$ possui alguma singularidade, então podemos definir suas projeções em duas regiões distintas:

$$|u_{k_1 k_2}^{II}\rangle = \langle x^0, u^0 | u_{k_1 k_2} \rangle, \quad (4.2.12)$$

definida em H_{II} , e

$$|u_{k_1 k_2}^I\rangle = \langle x^1, u^1 | u_{k_1 k_2} \rangle, \quad (4.2.13)$$

definida em H_I . Na borda ∂H (ver Figura 13) entre H_{II} e H_I há uma diferença de fase, de modo que as projeções estão relacionadas de acordo com

$$|u_{k_1 k_2}^{II}\rangle = \exp[i\chi(k_1, k_2)] |u_{k_1 k_2}^I\rangle, \quad (4.2.14)$$

sendo que $\chi(k_1, k_2)$ é uma função suave definida sobre o contorno ∂H . Como sabemos, o campo vetorial é definido pelas funções de onda. Portanto, carregar a diferença de fase para o campo vetorial $\mathbf{A}(k_1, k_2)$ equivale a realizar a transformação de *gauge*

$$\mathbf{A}_{II}(k_1, k_2) = \mathbf{A}_I(k_1, k_2) + i\nabla_k \chi(k_1, k_2). \quad (4.2.15)$$

Aplicando o teorema de Stokes às regiões H_I e H_{II} separadamente, obtemos:

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \left\{ \int_{H_I} d^2k [\nabla_k \times \mathbf{A}_I(k_1, k_2)]_3 + \int_{H_{II}} d^2k [\nabla_k \times \mathbf{A}_{II}(k_1, k_2)]_3 \right\}, \quad (4.2.16)$$

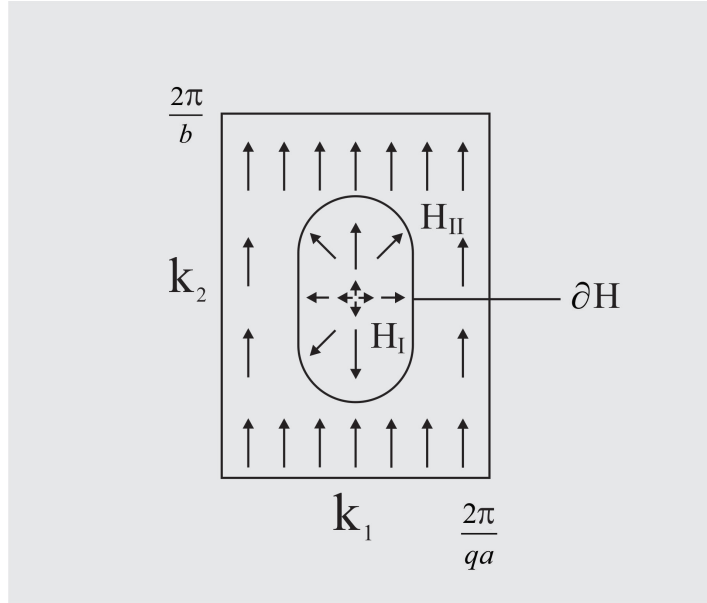


Figura 13: Diagrama da fase da função de onda na zona de Brillouin magnética. A zona é dividida em duas partes H_I e H_{II} , sendo que H_I contém um zero da função de onda. Deve-se notar que a zona de Brillouin aqui é periódica nas duas direções de k , constituindo um toróide T^2 .

que resulta em

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial H} d\mathbf{k} \cdot [\mathbf{A}_I(k_1, k_2) - \mathbf{A}_{II}(k_1, k_2)], \quad (4.2.17)$$

onde a integral se dá sobre o contorno ∂H e a mudança de sinal ocorre em função das diferentes orientações de integração em H_I e H_{II} . Agora, da eq. (4.2.15), vimos que podemos reescrever

$$i\nabla_k \chi(k_1, k_2) = \mathbf{A}_I(k_1, k_2) - \mathbf{A}_{II}(k_1, k_2). \quad (4.2.18)$$

Substituindo na eq. (4.2.17), obtemos o resultado desejado:

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} n, \quad (4.2.19)$$

com

$$n = \frac{1}{2\pi} \int_{\partial H} d\mathbf{k} \cdot \nabla_k \chi(k_1, k_2), \quad (4.2.20)$$

onde n é o número de Chern, e deve ser um inteiro [12] porque os dois vetores de estado devem apontar na mesma direção após completar uma revolução em torno de ∂H . Vimos aqui que a quantização da condutância está relacionada à diferença de fase entre as funções de onda definidas em regiões com e sem singularidades (zeros), respectivamente. Fisicamente, pode-se perceber que os zeros da função de onda ocorrem para pontos em que o fluxo magnético atravessa a célula unitária. Portanto, quando a energia de Fermi encontra-se entre dois níveis de Landau, tem-se que a condutância Hall apresenta valores inteiros bem definidos em unidades de e^2/h , relacionados à topologia não trivial de \mathbf{A} na zona de Brillouin magnética.

4.3 Estados de Borda

A análise qualitativa do comportamento das condutividades σ_{xy} e σ_{yy} com a variação do campo magnético permite notar que, para a σ_{xy} em um *plateau*, a condutividade σ_{yy} é zero. Analisando a estrutura de bandas da Figura 8, e supondo que a energia de Fermi encontra-se em um gap enquanto a condutividade σ_{xy} é constante, pode-se concluir que o estado Hall quântico é equivalente a um isolante comum [17]. Porém, como vimos, o efeito Hall quântico é caracterizado por um número topológico n que é finito para esse estado, mas deve ser 0 para um isolante clássico. Dessa forma, na borda da amostra metálica (considerando a interface entre um valor inteiro $n \neq 0$ e o vácuo, onde $n = 0$) é necessário que o gap de energia desapareça para que o número de Chern n possa mudar de valor. O resultado disso é que nas bordas da amostra metálica pode haver condução. Classicamente, pode-se imaginar que as órbitas de ciclotron fazem com que os elétrons rebatem nas bordas e as percorram em direções contrárias, em cada borda (ver Figura 14).

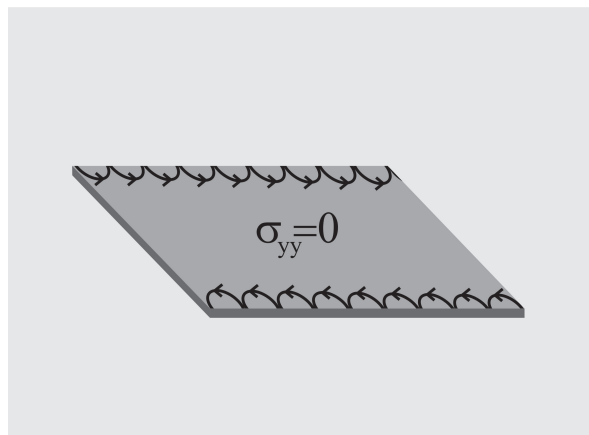


Figura 14: As bordas da amostra devem apresentar correntes em sentidos contrários, devido às órbitas de ciclotron dos elétrons.

Quanticamente, isso significa que o valor do operador corrente longitudinal nas bordas é diferente de zero, e isso ocorre em função da assimetria do potencial nessas regiões. Esse efeito é importante para o entendimento de sistemas quânticos semelhantes, como os isolantes topológicos bidimensionais.

5 Resultados Recentes: Efeito Hall Quântico Fracionário

Desde a descoberta do efeito Hall quântico inteiro, descrito nas seções acima, outros sistemas topológicos têm sido investigados em detalhe. Em 1983, Horst Störmer, Daniel Tsui e colaboradores [18] descobriram que, em gases de elétrons confinados em interfaces de semicondutores com amostras mais puras e campos mais intensos, a condutância Hall pode assumir valores fracionários de e^2/h .

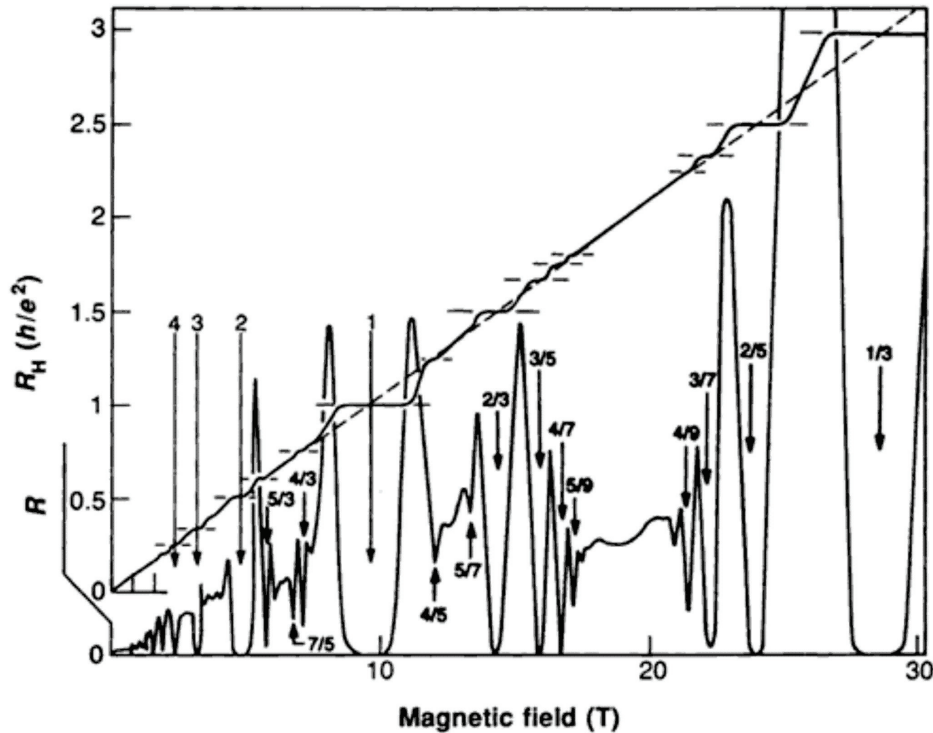


Figura 15: O resultado experimental obtido por Störmer, Tsui e colaboradores para o efeito Hall quântico fracionário. A linha crescente mostra os *plateaus* da resistência transversal Hall em função do campo magnético como frações de e^2/h . Os picos e zeros correspondem à resistência longitudinal, que tem um máximo na transição entre os *plateaus* (figura extraída de Chakraborty et al. [14]).

Esse resultado inesperado forçou uma nova interpretação teórica¹⁷ do efeito Hall, que leva em consideração a interação elétron-elétron na amostra. O estado Hall quântico fracionário é de especial interesse na área de computação quântica, uma vez que é capaz de gerar excitações conhecidas como anyons não-abelianos¹⁸. Essas excitações, capazes de carregar valores fracionários da carga fundamental, são promissoras na realização experimental de algoritmos quânticos uma vez que, por serem não-localizadas na amostra, são tolerantes à presença de impurezas, o que constitui um sistema computacional pouco sujeito a erros.

¹⁷A teoria do efeito Hall quântico fracionário é devida a Robert Laughlin, que por essa contribuição dividiu o prêmio Nobel de 1998 com Stormer e Tsui.

¹⁸Anyons são excitações que obedecem estatísticas intermediárias entre aquelas de bósons e férmions frente a trocas de partículas. O termo *não-abeliano* refere-se ao fato que a álgebra referente a esses grupos de partículas é não-comutativa.

Outro sistema de interesse atual é chamado efeito Hall quântico de spin, no qual o tratamento da degenerescência de spin conduz à interpretação que as correntes de borda fluem em sentidos contrários na amostra para diferentes orientações de spin. Como foi visto, o efeito Hall quântico é observado para a energia de Fermi localizada em um gap entre os níveis de Landau; qualitativamente, o sistema é análogo a um isolante comum, exceto pelo seu número topológico. O isolante Hall quântico de spin consitui, portanto, um isolante na região central da amostra bidimensional, mas um condutor nas bordas. Por esse motivo, é também conhecido como um *isolante topológico 2D*. Em três dimensões, um isolante topológico é um material que é isolante no *bulk* e um condutor na superfície. Isolantes topológicos cuja superfície é supercondutora também já possuem tratamento teórico [17]; sistemas desse tipo suportam excitações conhecidas como *férmions de Majorana*, extensivamente estudados em física de altas energias e partículas elementares.

6 Conclusões e Trabalho Futuro

A partir do estudo de conceitos fundamentais da mecânica quântica, como as fases geométricas e a invariância de *gauge*, foi possível desenvolver uma análise da explicação teórica para o efeito Hall quântico inteiro, umas das principais descobertas experimentais do século XX.

Os níveis de Landau encontrados para a energia de um elétron confinado a uma região bidimensional sujeita a um campo elétrico longitudinal e um campo magnético perpendicular explicam qualitativamente o resultado obtido experimentalmente por von Klitzing para a quantização da condutividade Hall. No entanto, uma explicação completa em termos matemáticos vem apenas com o trabalho de Laughlin, onde a condutividade é proporcional ao número de Chern, resultante da integração da curvatura adiabática frente ao aumento do fluxo magnético através de uma amostra cilíndrica. Esse resultado demonstra o caráter topológico da condutividade Hall, uma vez que a curvatura adiabática é análoga à curvatura local integrada na fórmula de Gauss-Bonnet.

Alternativamente, o trabalho teórico de Thouless, Kohmoto, Nightingale e den Nijs alcança o mesmo resultado, partindo do modelo de Hofstadter para elétrons em um potencial periódico bidimensional. Nesse caso, o invariante de Chern é obtido a partir da fórmula da resposta linear de Nakano-Kubo, através da integração da fase em duas regiões complementares da zona de Brillouin magnética.

O entendimento do efeito Hall quântico inteiro abre espaço para o estudo de sistemas topológicos semelhantes, como o efeito Hall quântico fracionário e os isolantes topológicos. O desenvolvimento relacionado a esses fenômenos é de especial interesse, considerando as suas possíveis aplicações no campo da informação quântica.

7 Apêndice: Dedução da Fórmula da Resposta Linear

O formalismo de Kubo para a condutividade Hall [14] parte de um Hamiltoniano perturbado

$$H = H_0 + V(t) \quad (7.0.1)$$

onde $V(t)$ é a perturbação dependente do tempo. Pode-se a ele associar a matriz densidade

$$\rho = \rho_0 + \Delta\rho(t). \quad (7.0.2)$$

No ensemble grande-canônico, a matriz densidade não-perturbada é escrita como

$$\rho_0 = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H_0 - \mu\hat{N})}, \quad (7.0.3)$$

onde \hat{N} é o operador número de partículas e Z é a função de partição grande-canônica, que é escrita como

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta(H_0 - \mu\hat{N})}. \quad (7.0.4)$$

A matriz de densidade obedece a equação de Liouville [9]

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]. \quad (7.0.5)$$

No *picture* de interação (ou *picture* de Dirac) a matriz densidade pode ser reescrita como

$$\rho^I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \rho e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}. \quad (7.0.6)$$

Substituindo essa relação em (7.0.5) e mantendo apenas os termos lineares da perturbação, obtém-se

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Delta\rho^I(t) = [V^I(t), \rho_0]. \quad (7.0.7)$$

Agora considera-se que para $t \rightarrow -\infty$ a perturbação é desligada adiabaticamente, então

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \Delta\rho(t) = 0, \quad (7.0.8)$$

e a matriz de perturbação fica escrita

$$\Delta\rho^I(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [V^I(t'), \rho_0]. \quad (7.0.9)$$

Considerando agora uma quantidade observável genérica B , o seu valor esperado deve ser dado por

$$\langle B(t) \rangle = \text{Tr} \{B\rho(t)\} = \text{Tr} \{B^I(t)\rho^I(t)\}. \quad (7.0.10)$$

Pode-se assumir por simplicidade que, no estado não-perturbado, o valor esperado de B é $\langle B(t) = 0 \rangle$. Assim, é possível escrever

$$\langle B(t) \rangle = \text{Tr} \{B^I(t)\Delta\rho^I(t)\}, \quad (7.0.11)$$

ou seja

$$\langle B(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr}\{[V^I(t'), \rho_0] B^I(t)\}, \quad (7.0.12)$$

que, pela invariância cíclica do traço pode ser escrita como

$$\langle B(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr}\{\rho_0 [V^I(t'), B^I(t)]\}. \quad (7.0.13)$$

Agora, é possível expressar a perturbação $V(t)$ como uma superposição de suas componentes de Fourier. Uma componente qualquer é escrita como $A e^{-i(\omega+i\eta)t}$, com o fator de convergência $\eta > 0$, que será feito tender a zero ao final do cálculo. Portanto, para essa componente, o valor esperado do operador B será

$$\langle B(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr}\{\rho_0 [A, B^I(t-t')]\} e^{-i(\omega+i\eta)t'}. \quad (7.0.14)$$

A função de resposta linear é definida através da relação

$$\langle B(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi_{BA}(t-t') e^{-i(\omega+i\eta)t'}; \quad (7.0.15)$$

comparando as duas relações, obtém-se

$$\chi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar} \text{Tr}\{\rho_0 [A, B^I(t)]\} \theta(t) = -\frac{i}{\hbar} \text{Tr}\{[A, \rho_0] B^I(t)\} \theta(t), \quad (7.0.16)$$

onde $\theta(t)$ é a função degrau. Considerando agora o observável B como sendo o μ -ésimo componente da densidade de corrente elétrica, escreve-se

$$-eJ_\mu(\mathbf{r}) = \frac{e}{2} \sum_{i=1}^N \{v_{i\mu} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) v_{i\mu}\}, \quad (7.0.17)$$

onde \mathbf{v}_i é o operador velocidade atuando sobre as coordenadas da i -ésima partícula. A condutividade, por sua vez, é a resposta linear para um campo elétrico \mathbf{E} . Tem-se que o potencial perturbativo pode ser escrito como

$$V(t) = e \sum_{\mu} X_\nu E_\nu(t), \quad (7.0.18)$$

onde $X_\nu = \sum_{i=1}^N r_{i\nu}$. Considerando agora $A = e X_\nu$ e $B = -e J_\nu(\mathbf{r})$, (7.0.16) define o tensor condutividade $\sigma_{\mu\nu}$:

$$\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t) = -i \frac{e^2}{\hbar} \theta(t) \text{Tr}\{\rho_0 [X_\nu, J_\nu^I(\mathbf{r}, t)]\}. \quad (7.0.19)$$

Os autoestados do Hamiltoniano não-perturbado são escritos como

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle; \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (7.0.20)$$

sendo que $n = 0$ é o estado fundamental. Considerando apenas os elementos diagonais de ρ_0 , escrevemos a condutividade como

$$\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t) = -i \frac{e^2}{\hbar} \theta(t) \sum_{n>0} \{ \langle 0|X_\nu|n\rangle \langle n|J_\nu(\mathbf{r})|0\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_0)t} - \langle n|X_\nu|0\rangle \langle 0|J_\mu(\mathbf{r})|n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n-E_0)t} \}. \quad (7.0.21)$$

Integrando no tempo para obter a condutividade estática, tem-se que

$$\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\eta t} \sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t), \quad (7.0.22)$$

onde se utiliza o fator de convergência $\eta > 0$. A condutância é escrita como a média espacial da condutividade, ou seja

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{1}{A} \int d\mathbf{r} \sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}) \quad (7.0.23)$$

onde A é a área da amostra. Sabendo ainda que a corrente integrada sobre a posição é a componente do operador velocidade total,

$$J_\mu = v_\mu = \int d\mathbf{r} J_\mu(\mathbf{r}), \quad (7.0.24)$$

pode-se escrever o tensor condutância como

$$\sigma_{\mu\nu} = e^2 \sum_{n>0} \frac{\langle 0|X_\nu|n\rangle \langle n|v_\mu|0\rangle + \langle n|X_\nu|0\rangle \langle 0|v_\mu|n\rangle}{E_n - E_0}. \quad (7.0.25)$$

Notando que o operador velocidade $v_\mu = \dot{X}_\mu$ obedece a equação de movimento de Heisenberg

$$i\hbar v_\mu = i\hbar \frac{d}{dt} X_\mu = [X_\mu, H_0], \quad (7.0.26)$$

reescreve-se o tensor condutância na forma antissimétrica

$$\sigma_{\mu\nu} = i \frac{e^2 \hbar}{A} \sum_{n>0} \frac{\langle 0|v_\nu|n\rangle \langle n|v_\mu|0\rangle + \langle 0|v_\mu|n\rangle \langle n|v_\nu|0\rangle}{(E_n - E_0)^2}. \quad (7.0.27)$$

Conclui-se assim que a condutância Hall é o elemento fora da diagonal

$$\sigma_H = \sigma_{yx} = i \frac{e^2 \hbar}{A} \sum_{n>0} \frac{(v_x)_{0n} (v_y)_{n0} - (v_y)_{0n} (v_x)_{n0}}{(E_n - E_0)^2}. \quad (7.0.28)$$

Referências

- [1] Ashcroft, N. W.; Mermin, N. D. *Física do Estado Sólido*. São Paulo: Cengage Learning, 2011.
- [2] Klitzing, K. v.; Dorda, G; Pepper, M. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance. *Physical Review Letters*, v. 45, p.494-497, 1980.
- [3] Laughlin, R. B. Quantized Hall Conductivity in Two Dimensions. *Physics Review B*, v. 23, p.5632-5633, 1981.
- [4] Thouless, D. J.; Kohmoto, M.; Nightingale, M. P.; den Nijs, M. Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential. *Physical Review Letters*, v.49, p.405-408, 1982.
- [5] Kohmoto, M. Topological Invariant and the Quantization of Hall Conductance. *Annals of Physics*, v. 160, p.343-354, 1985.
- [6] Pachos, J. K.; *Introduction to Topological Quantum Computation*. Cambridge: Cambridge University Press, 2012.
- [7] Griffiths, D. J.; *Introduction to Quantum Mechanics*. 2 ed. Upper Saddle River, New Jersey: Pearson Prentice Hall, 2005.
- [8] Liboff, R. L.; *Introductory Quantum Mechanics*. Estados Unidos: Addison-Wesley, 1980.
- [9] Arfken, G. B.; Weber, H. J.; *Física Matemática - Métodos Matemáticos Para Engenharia e Física*. 6 ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.
- [10] Berry, M. Anticipations of the Geometric Phase. *Physics Today*, v.43, p.34-40, 1990.
- [11] Girvin, S.; *Introduction to the Quantum Hall Effect*. Basel: Birkhäuser Verlag, 2005.
- [12] Avron, J. E.; Osadchy, D.; Seiler, R. A Topological Look at the Quantum Hall Effect. *Physics Today*, v.56, p.38-42, 2003.
- [13] Griffiths, D. J.; *Introduction to Electrodynamics*. 3 ed. Upper Saddle River, New Jersey: Pearson Prentice Hall, 1999.
- [14] Chakraborty, T; Pietiläinen, P.; *The Quantum Hall Effects: Fractional and Integral*. 2 ed. Heidelberg: Springer-Verlag, 1995.
- [15] Fradkin, E.; *Field Theories of Condensed Matter*. Redwood City, CA: Addison-Wesley, 1991.
- [16] Hofstadter, D.; Energy Levels and Wave Functions of Bloch Electrons in Rational and Irrational Magnetic Fields *Physics Review B*, v14, p.2239-2249, 1976.

- [17] Kane, C. L.; M. C. Hasan. Colloquium: Topological Insulators. *Reviews of Modern Physics*, v.82, p.3045-3067, 2010.
- [18] Störmer, H. L.; Tsui D. C.; Gossard, A. C.; Two-dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit. *Physical Review Letters*, v.48, p.1559-1562, 1982.
- [19] Thouless, D. J.; *Topological Quantum Numbers in Non-Relativistic Physics*. Singapore: World Scientific, 1998.