

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Mariana de Jesus Boscolo

Introdução à Física do efeito Hall

São Carlos

2024

Mariana de Jesus Boscolo

Introdução à Física do efeito Hall

Trabalho de Conclusão de Curso - Monografia
apresentado ao Curso de graduação em
Física na habilitação Teórico-Experimental
no Instituto de Física de São Carlos da
Universidade de São Paulo como requisito
para a obtenção do título de Bacharel em
Física.

Orientador: Prof. Dr. José Abel Hoyos Neto

São Carlos

2024

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

RESUMO

Este trabalho apresenta uma introdução a sistemas de interesse em matéria condensada, com foco especial no efeito Hall quântico inteiro. Primeiramente, é realizada uma análise do efeito Hall clássico, que fornece ferramentas essenciais para a compreensão do efeito Hall quântico. Em seguida, resolve-se a equação de Schrödinger para sistemas com campos elétrico e magnético, utilizando dois *gauges* diferentes. Além disso, introduz-se o conceito de fase de Berry e realiza-se uma análise do fenômeno de fluxo espectral, fundamental para compreender o comportamento da condutividade no efeito Hall. Discute-se também o papel da desordem na formação de platôs no gráfico da resistividade do efeito Hall, e desenvolve-se o cálculo da condutividade e seu caráter quantizado. Por fim, aplica-se a formalização da segunda quantização para o estudo do modelo *tight-binding*, analisando tanto o caso bidimensional sem desordem quanto o caso unidimensional, considerando os efeitos da desordem.

Palavras-chave: Efeito Hall. Topologia. Localização de Anderson.

1 INTRODUÇÃO

O efeito Hall quântico inteiro trata-se de um sistema formado por elétrons não interagentes com movimento restrito a um plano perpendicular a um forte campo magnético. Os elétrons estão confinados a uma área do plano que, em grande parte do tempo, vamos tratar como uma área retangular, por onde passa um campo elétrico.

Tal organização do sistema faz com que a condutividade e a resistividade da amostra não sejam mais números, e sim, matrizes. A resistividade, por exemplo, é dada por uma matriz da forma

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ -\rho_{xy} & \rho_{xx} \end{pmatrix} \quad (1)$$

O interessante do efeito Hall quântico inteiro é que, quando mediu-se, experimentalmente, o valor da resistividade ρ_{xy} em função do campo magnético B , o resultado foi excepcional: para valores maiores de B , o comportamento de ρ_{xy} se deu por meio de platôs, como pode ser visto na Fig. 1, dados por

$$\rho_{xy} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{\nu}, \quad (2)$$

com $\nu \in \mathbb{N}^*$. Os centros dos platôs ocorriam em $B = \frac{2\pi\hbar n}{\nu e}$, onde n é a densidade de elétrons.

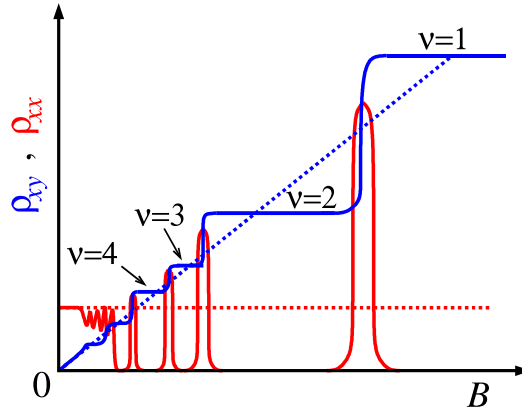


Figura 1 – Comportamento esquemático das resistividades longitudinal ρ_{xx} e transversal ρ_{xy} como função do campo magnético no efeito Hall quântico inteiro. A curva vermelha contínua representa o resultado experimental de ρ_{xx} , a curva azul contínua representa o resultado experimental de ρ_{xy} , a curva vermelha pontilhada representa a expectativa clássica para ρ_{xx} e a curva azul pontilhada representa a expectativa clássica para ρ_{xy} .

Esse resultado era encontrado com ainda mais precisão quando a desordem do sistema aumentava, ou seja, o valor inteiro de ν era medido com ainda mais exatidão. Esse resultado claramente discordava do resultando clássico, como veremos mais a seguir.

1.1 Efeito Hall clássico

Considera-se então uma placa de elétrons restrita ao plano (x, y) perpendicular a um campo magnético constante $\vec{B} = (0, 0, B)$, com o campo elétrico \vec{E} constante na direção x , como na Fig. 2. Sendo M a massa de um elétron, $-e$ a sua carga e \vec{v} a sua velocidade. Para resolvermos classicamente esse caso, é interessante utilizarmos o modelo de Drude¹, de forma que a equação de movimento dos elétrons é dada por

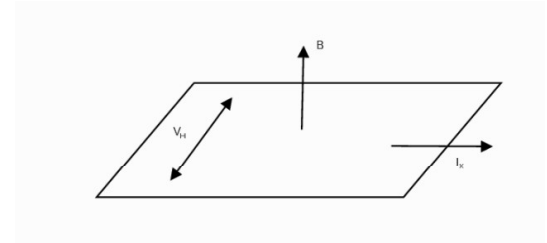


Figura 2 – Desenho sistemático do efeito Hall clássico.

$$M \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{v} \times \vec{B} - e\vec{E} - \frac{M\vec{v}}{\tau} \quad (3)$$

onde τ é chamado tempo de espalhamento². Para o caso sem considerar o termo de espalhamento, e sem campo elétrico, a solução é dada por:

$$x(t) = X - R \sin(\omega_B t + \phi) \quad \text{e} \quad y(t) = Y + R \cos(\omega_B t + \phi) \quad (4)$$

onde $\omega_B = \frac{eB}{M}$ é chamada frequência de ciclotron. Por esse resultado temos que a trajetória do elétron seria uma circunferência de raio R centrada em (X, Y) .

¹ No modelo de Drude, considera-se um termo de fricção linear que, por sua vez, resumiria tudo aquilo que pode estar impedindo o elétron de seguir sua trajetória.

² O tempo médio entre colisões dos elétrons, por exemplo.

Agora, considerando o campo elétrico $\vec{E} = (E, 0, 0)$, como estamos interessados no caso de equilíbrio, tomamos $\frac{d\vec{v}}{dt} = 0$ e então temos $\vec{v} + \frac{e\tau}{M}\vec{v} \times \vec{B} = \frac{e\tau}{M}e\vec{E}$. Essa equação pode ser reescrita por

$$\begin{pmatrix} 1 & \omega_B\tau \\ -\omega_B\tau & 1 \end{pmatrix} \vec{J} = \frac{e^2n\tau}{m}\vec{E} \quad (5)$$

onde $\vec{J} = -ne\vec{v}$ é a densidade de corrente, e n é densidade dos portadores de carga. Repare que essa equação pode ser reescrita como a lei de Ohm $\vec{J} = \sigma\vec{E}$, em que a condutividade σ é uma matriz da forma

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} = \frac{\sigma_{DC}}{1 + \omega_B^2\tau} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_B\tau \\ \omega_B\tau & 1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

onde $\sigma_{DC} = \frac{ne^2\tau}{M}$ é a condutividade da corrente DC na ausência do campo magnético. A resistividade, que é dada pelo inverso da condutividade, é da forma

$$\rho = \frac{1}{\sigma_{DC}} \begin{pmatrix} 1 & \omega_B\tau \\ -\omega_B\tau & 1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Os elementos de matriz da resistividade $\rho_{xx} = \frac{M}{ne^2\tau}$ e $\rho_{xy} = \frac{B}{ne}$ tem propriedades muito interessantes. O primeiro só depende de τ e tende a zero quando τ tende a infinito, ou seja, quando as colisões dos elétrons tornam-se mais escassas. A resistividade ρ_{xy} , por outro lado, não depende de τ , implicando sua independência das impurezas do sistema, além de que ele depende linearmente de B . Na Fig. 1, vemos o gráfico de ambas resistividades em função do campo magnético.

Acima consideramos que o sistema se encontra em equilíbrio, o qual é de fato alcançado. Considerando a placa de elétrons sem o campo magnético, como já foi comentado, teríamos apenas uma corrente na direção de \vec{E} (vamos assumir que é a direção x). Ligando então o campo magnético, este desviaria os elétrons na direção y , de forma que os elétrons começariam a se acumular nas bordas inferiores da placa, criando uma tensão $V_H = I_x B / (ned)$ como na Fig. 2, onde d é a espessura da placa. O equilíbrio é atingido quando o campo elétrico em y é forte o suficiente para anular o desvio de \vec{B} , e então voltaríamos a ter apenas uma corrente na direção x .

2 ELÉTRONS LIVRES NO CAMPO MAGNÉTICO: TRATAMENTO QUÂNTICO

Nesse tópico, faremos uma introdução da mecânica quântica de elétrons livres no campo eletromagnético em duas dimensões.

2.1 Níveis de Landau

O Hamiltoniano de uma partícula de carga $-e$ em um campo magnético $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ é dado por

$$H = \frac{1}{2M}(\vec{p} + e\vec{A})^2 \quad (8)$$

onde $\vec{p} = M\dot{\vec{x}} - e\vec{A}$ é o operador do momento canônico advindo da Lagrangiana (aqui, \vec{x} é o vetor posição). Definimos o momento cinético $\vec{\pi} = \vec{p} + e\vec{A} = M\dot{\vec{x}}$ cuja relação de comutação é $[\pi_x, \pi_y] = -ie\hbar B$, a partir dos quais definimos os operadores de abaixamento e levantamento $a = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}}(\pi_x - i\pi_y)$ e $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}}(\pi_x + i\pi_y)$, respectivamente, isomórficos aos do oscilador harmônico, que podem ser encontrados em [2]. Dessa forma, reescrevemos o Hamiltoniano como $H = \frac{1}{2M}\vec{\pi} \cdot \vec{\pi} = \hbar\omega_B \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$. Os níveis de energia então são dados por

$$E_n = \hbar\omega_B \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (9)$$

graficados na Fig. 3. Esses níveis de energia são chamados níveis de Landau. Será útil estudarmos a degenerescência dos níveis de Landau para duas escolhas diferentes de potencial vetor: o *gauge* de Landau e o *gauge* simétrico.

2.1.1 Gauge de Landau

Inicialmente escolhemos o *gauge* de Landau, temos então o potencial vetor $\vec{A} = xB\hat{y}$. Repare que \vec{A} é invariante por translação em y , dessa forma, supomos que os autoestados do Hamiltoniano sejam também autoestados de p_y , da forma $\psi_k(x, y) = e^{iky}f_k(x)$. Simplificamos então o Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2M}(p_x^2 + (p_y + eB)^2) = \frac{1}{2M}(p_x^2 + (\hbar k + eB)^2) = \frac{1}{2M}p_x^2 + \frac{M\omega_B^2}{2}(x + kl_B^2)^2$$

dito que $\hbar k$ é autovalor de p_y . Repare que esse é o Hamiltoniano do oscilador harmônico deslocado, onde $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ é o chamado comprimento magnético.

As funções de onda então serão da forma

$$\psi_{n,k}(x, y) \sim e^{iky} H_n(x + kl_B^2) e^{-(x+kl_B^2)/(2l_B^2)} \quad (10)$$

onde H_n são os polinômios de Hermite. As funções de onda são exponencialmente localizadas em torno de $x = -kl_B^2$. Com essa aproximação, temos que o número de estados que cabem em nossa amostra retangular de lados L_x e L_y , é dado por $N = \frac{L_y}{2\pi} \int_{-L_x/l_B^2}^0 dk = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2} = \frac{eBA}{2\pi\hbar}$ onde $A = L_x L_y$ é a área da amostra.

Acrescentando um campo elétrico na direção x , atualizamos o Hamiltoniano para

$$H = \frac{1}{2M}(p_x^2 + (\hbar k + eB)^2) + eEx = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{M\omega_B^2}{2} \left(x + kl_B^2 + \frac{ME}{eB^2}\right)^2 - \frac{ME^2}{2B^2} - \hbar k \frac{E}{B} \quad (11)$$

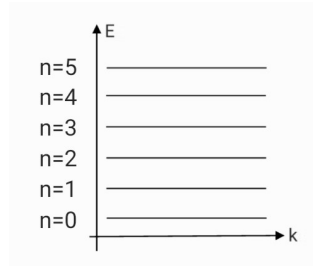


Figura 3 – Níveis de Landau.

Na segunda igualdade, houve completamento de quadrados. Temos então os níveis de Landau (vide Fig. 4) dados por

$$E_{n,k} = \hbar\omega_B \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{ME^2}{2B^2} - \hbar k \frac{E}{B} \quad (12)$$

e as autofunções são deslocadas em x : $\psi(x, y) = \psi_{n,k} \left(x + \frac{ME}{eB^2}, y \right)$.

Agora os níveis de energia dependem linearmente de k , e os estados sofrem um desvio na direção de y cuja velocidade de grupo é dada por

$$v_y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{n,k}}{\partial k} = -\frac{e}{\hbar} El_B^2 = -\frac{E}{B} \quad (13)$$

Para chegarmos no resultado acima, basta notarmos que $\psi_n(y, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(k) e^{i(ky - \frac{E_{n,k}t}{\hbar})} dk$. Considerando uma aproximação de Taylor $E(k) \approx E_0 + (k - k_0)E'_0$, onde $E'_0 = \frac{\partial E(k)}{\partial k}$ em k_0 , temos

$$\psi_n(y, t) = e^{i(k_0 y - \frac{E_0 t}{\hbar})} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(k) e^{i(k - k_0) \left(y - \frac{E'_0 t}{\hbar} \right)} dk \quad (14)$$

onde o termo da função de onda caracterizado pela integral é uma onda envelope com velocidade $v_y = E'_0/\hbar$.

2.1.2 Gauge simétrico

O *gauge* simétrico é útil para problemas com simetria cilíndrica, o potencial vetor é dado por $\vec{A} = -\frac{yB\hat{x}}{2} + \frac{xBy\hat{y}}{2}$, que não é invariante sob nenhuma simetria translacional, contudo preserva simetria rotacional pelo eixo z . A degenerescência dos estados será evidenciada através de um novo momento definido por $\vec{\pi} = \vec{p} - e\vec{A}$. Para o *gauge* simétrico em específico, temos a relação de comutação $[\pi_i, \pi_j] = 0$, para $i = x, y$ e $j = x, y$. Definimos então, respectivamente, os operados de abaixamento e levantamento: $b = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}}(\tilde{\pi}_x + i\tilde{\pi}_y)$ e $b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}}(\tilde{\pi}_x - i\tilde{\pi}_y)$.

Um estado genérico no espaço de Hilbert é dado por

$$|n, m\rangle = \frac{a^{\dagger n} b^{\dagger m}}{\sqrt{n!m!}} |0, 0\rangle \quad (15)$$

onde m é o número relacionado ao momento angular da função de onda. Para encontrarmos a autofunção do nível de Landau mais baixo, faremos algumas manipulações. Primeiro, considere as seguintes definições:

$$z = x - iy \quad \text{e} \quad \bar{z} = x + iy$$

$$\partial = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad \text{e} \quad \bar{\partial} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right).$$

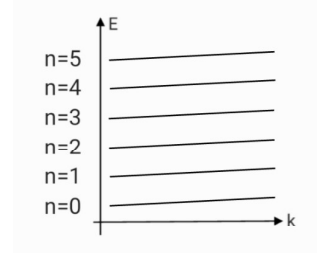


Figura 4 – Níveis de Landau de uma configuração com campo elétrico.

Então, reescrevemos os operadores de abaixamento e levantamento:

$$\begin{aligned} a &= -i\sqrt{2} \left(l_B \bar{\partial} + \frac{z}{4l_B} \right) \quad \text{e} \quad a^\dagger = i\sqrt{2} \left(l_B \partial - \frac{\bar{z}}{4l_B} \right) \\ b &= -i\sqrt{2} \left(l_B \partial + \frac{\bar{z}}{4l_B} \right) \quad \text{e} \quad b^\dagger = i\sqrt{2} \left(l_B \bar{\partial} - \frac{z}{4l_B} \right). \end{aligned}$$

O estado do nível de Landau mais baixo é aniquilado por a e por b , logo, temos

$$\psi_{0,m=0} \sim e^{-|z|^2/(4l_B^2)}. \quad (16)$$

As autofunções para $m \neq 0$ são encontradas utilizando o operador de levantamento b^\dagger , de forma que obtemos:

$$\psi_{0,m} \sim \left(\frac{z}{l_B} \right)^m e^{-|z|^2/(4l_B^2)}. \quad (17)$$

O restante das autofunções pode ser encontrado aplicando o operador de levantamento a^\dagger . A autofunção de momento angular m concentra-se em uma região de raio $r = \sqrt{2m}l_B$.

É fácil ver que m é o número quântico associado ao momento angular, basta notar que o operador de momento angular é dado por

$$L = i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \hbar(z\partial - \bar{z}\bar{\partial}),$$

se operarmos ele na autofunção do nível de Landau mais baixo, obtemos $L\psi_{0,m} = \hbar m\psi_{0,m}$. Logo, os autovalores de L são $\hbar m$.

Vale notar que, para os diferentes *gauge*, encontramos diferentes autoestados. Isto não é um problema, visto que os estados não contribuem fisicamente para o nosso estudo. Permanece invariante, contudo, o número de estados que cabe em nossa amostra de área A . Considere uma amostra circular de área $A = \pi R^2$, o número de estados, pela aproximação acima feita para a localização dos estados, é dado por

$$N = \int_0^{\mathcal{M}} dm = \int_0^{R^2/(2l_B^2)} dm = \frac{R^2}{2l_B^2} = \frac{A}{2\pi l_B^2} = eBA/(2\pi\hbar) \quad (18)$$

onde \mathcal{M} seria o maior momento cujo estado cabe na amostra.

2.2 Fase de Berry

Considera-se um Hamiltoniano qualquer de um sistema que depende das coordenadas generalizadas e de certos parâmetros fixos determinados por fatores externos, vamos então variar esses parâmetros adiabaticamente³ e veremos o que acontece com seus autoestados.

³ O teorema adiabático prediz que, se variarmos esses parâmetros de maneira suficientemente lenta, o estado atual do sistema (que por suposição, é não degenerado) permanecerá o mesmo por todo o processo de variação, ou seja, não será excitado para nenhum nível mais alto ou mais baixo de energia. Em outras palavras, não haverá cruzamento de nível.

Digamos que o sistema encontra-se em um certo estado (o estado fundamental, por exemplo), com uma certa escolha fixa de parâmetros $\vec{\lambda}$. Considerando que os autoestados dependam dos parâmetros, ao variá-los lentamente de forma que a escolha de parâmetros final seja igual a inicial, temos que o estado final do sistema é igual ao estado inicial do sistema a menos de uma fase. Essa fase que depende da variação dos parâmetros é chamada fase de Berry. Vale notar que a fase ($e^{-iEt/\hbar}$) já existiria de antemão (diferente da fase de Berry), por conta da própria evolução temporal dos estados.

Para o cálculo da fase de Berry, consideremos a equação de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = H(\vec{\lambda}(t))|\psi\rangle$. Para cada escolha de parâmetros, fixamos um estado fundamental, formando então uma família de estados chamada de estados de referência $|n(\lambda)\rangle$. Depois de um ciclo do espaço dos parâmetros do Hamiltoniano, o estado do sistema será dado por $|\psi(t)\rangle = U(t)|n(\lambda(t))\rangle$, onde $U(t)$ é uma fase dependente do tempo. Projeta-se o estado em sua derivada temporal para a obtenção da seguinte relação

$$U^* \dot{U} = -\langle n|\dot{n}\rangle = -\langle n|\frac{\partial}{\partial \lambda^i}|n\rangle \dot{\lambda}^i. \quad (19)$$

Na equação acima, foi utilizada notação de Einstein. Vale lembrar que, como todos os estados de referência são estados fundamentais, consideramos que suas autoenergias são nulas. Podemos definir agora a conexão de Berry como $A_i(\lambda) = -i\langle n|\frac{\partial}{\partial \lambda^i}|n\rangle$. Para um caminho fechado, encontramos então a fase dada por

$$U(t) = \exp\left\{\left(-i \int A_i(\lambda) \dot{\lambda}^i dt\right)\right\} = \exp\left\{\left(-i \oint_C A_i(\lambda) d\lambda^i\right)\right\} \quad (20)$$

A conexão de Berry não é invariante por transformações de gauge no espaço de parâmetros, contudo, sua curvatura, dada por $F_{ij}(\lambda) = \frac{\partial A_j}{\partial \lambda^i} - \frac{\partial A_i}{\partial \lambda^j}$ é invariante. A fase de Berry pode ser reescrita pela curvatura da conexão utilizando o teorema de Stokes para dimensões mais altas: $U(t) = \exp\{(-i \int_S F_{ij}(\lambda) dS^{ij})\}$. Perceba que é uma integral de superfície no espaço dos parâmetros, e que seu resultado depende da superfície escolhida, evidenciando a dependência da fase de Berry em relação a variação dos parâmetros.

2.3 Fluxo Espectral

Consideremos um fluxo de campo magnético Φ delimitado por um cilindro, de forma que, fora do cilindro, o campo magnético é nulo, e, dentro, ele é constante. Podemos integrar o potencial vetor em um caminho fechado circular fora do cilindro, obtendo $\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} = \int \vec{B} \cdot d\vec{S} = \Phi$ que é satisfeito pelo potencial vetor em coordenadas cilíndricas $A_\phi = \frac{\Phi}{2\pi r}$. Temos então o Hamiltoniano do sistema

$$H = \frac{1}{2m}(p_\phi + eA_\phi)^2 = \frac{1}{2mr^2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{e\Phi}{2\pi}\right)^2. \quad (21)$$

Supondo que as autofunções do Hamiltoniano são da forma $\psi = e^{c\phi}$, e supondo condições periódicas de contorno, ou seja, $\psi(\phi) = \psi(\phi + 2\pi)$, obtemos as autofunções normalizadas

e suas devidas autoenergias, respectivamente:

$$\psi(\phi, r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} e^{-in\phi}, \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(n - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 \quad (22)$$

onde $n \in \mathbb{Z}$ e $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{e}$ é chamado quantum de fluxo. O interessante desse sistema é que, se o fluxo for um múltiplo de Φ_0 , o espectro das energias não será diretamente afetado pelo fluxo dentro do cilindro, mas caso o fluxo não seja um múltiplo de Φ_0 , o espectro é transladado. Imagine que o campo magnético está desligado no início, de modo que o fluxo é nulo, e o sistema encontra-se no estado fundamental (com $n = 0$), então vamos lentamente aumentando o fluxo magnético dentro do cilindro. Nesse caso, não podemos usar a fase de Berry para descobrirmos o estado final do sistema, já que não podemos garantir o não cruzamento de níveis de energia. Mas, quando o fluxo atingir o valor de Φ_0 , temos que a energia do estado nesse momento será a mesma energia do primeiro estado excitado em relação ao estado inicial, assim como cada nível de energia é transladado para o nível logo acima. Esse fenômeno chama-se fluxo espectral: a mudança de um parâmetro do Hamiltoniano causa a translação inteira dos níveis de energia.

3 A CONDUTIVIDADE NO EFEITO HALL QUÂNTICO INTEIRO

O motivo pelo qual o efeito Hall quântico inteiro se torna interessante é, de fato, a exatidão dos platôs presentes no gráfico da resistividade ρ_{xy} em função do campo magnético. Sobre esse fenômeno, podemos fazer os seguintes questionamentos:

1. Por que os platôs existem?
2. Por que esse fenômeno não é atrapalhado pela desordem do sistema, e, sim, favorecido?
3. Por que, em um platô, a resistividade tem o valor exato de $\rho_{xy} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{\nu}$ com $\nu \in \mathbb{N}^*$?

Neste tópico, deve ser feito um estudo básico sobre as possíveis respostas desses questionamentos. Começamos com um Hamiltoniano igual o descrito na Eq. ?? A densidade de corrente é dada por $\vec{J} = (e/A)\dot{\vec{x}}$, onde A é a área da amostra, e $M\dot{\vec{x}} = \vec{p} + e\vec{A}$. Parece razoável supor que a densidade de corrente total seria igual à corrente de todos os estados ocupados somados:

$$\vec{J} = -\frac{e}{MA} \sum_{\text{estados ocupados}} \langle \psi | i\hbar \nabla + e\vec{A} | \psi \rangle.$$

Na direção x , a densidade de corrente é nula, já que a média do momento em x é nula para todos os estados (como no oscilador harmônico), mas na direção y , temos:

$$J_y = -\frac{e}{MA} \sum_{n=1}^{\nu} \sum_k \langle \psi_{n,k} | \hbar k + exB | \psi_{n,k} \rangle.$$

Como as funções de onda são localizadas em $x = -\frac{\hbar k}{eB} - \frac{ME}{eB^2}$, temos que $\langle \psi_{n,k} | x | \psi_{n,k} \rangle = -\frac{\hbar k}{eB} - \frac{ME}{eB^2}$. Logo temos,

$$J_y = e\nu \sum_k \frac{E}{AB} = e\nu \frac{E}{AB} \sum_k 1 = e\nu \frac{E}{AB} N = e\nu \frac{E}{AB} \frac{AB}{\Phi_0} = e\nu \frac{E}{\Phi_0}$$

onde N é o número de estados que cabem na amostra, calculado na Eq. 18. A densidade de corrente então é dada por

$$\vec{J} = \begin{pmatrix} 0 \\ e\nu E/\Phi_0 \end{pmatrix} = \sigma \vec{E} \quad (23)$$

Dessa forma, temos que a condutividade e a resistividade assumem os seus valores esperados $\sigma_{xy} = \frac{-e\nu}{\Phi_0}$ e $\rho_{xy} = \frac{2\pi\hbar}{e^2\nu}$, respectivamente. Enfim, chegamos ao resultado obtido experimentalmente para os valores de ρ_{xy} para ν níveis de Landau preenchidos, contudo, esse modelo tem muitos pontos de insatisfação, a começar pelo fato de que ele não prevê nenhum platô, além de que nele é considerado que todos os estados colaboram igualmente para a condutividade, e também, em nenhum ponto foi considerada a desordem do sistema.

3.1 Modos de Borda

Antes de entrarmos com mais afinco no papel de desordem, é necessário comentar sobre a importância das bordas do sistema do efeito Hall. Consideremos, primeiramente, o caso em que o campo elétrico está desligado. Temos que, classicamente, a trajetória dos elétrons seria circular, como na Fig. 5, exceto por perto das bordas, onde os elétrons seriam obrigados a seguir por direções opostas. Em uma das bordas, os elétrons seguiriam todos ao longo de uma direção, e na outra borda, eles seguiriam pela direção contrária.

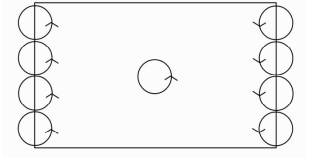


Figura 5 – Trajetória clássica dos elétrons por perto das bordas.

Dessa forma, na ausência do campo elétrico, a corrente desaparece. Agora, analisando o caso em que não temos apenas o campo magnético, consideramos o Hamiltoniano dado por

$$H = \frac{1}{2M} (p_x^2 + (p_y + eB)^2) + V(x), \quad (24)$$

onde $V(x)$ é um potencial qualquer, desde que seja suave o suficiente em escalas de distância l_B . A velocidade de grupo de desvio dos estados é dada por $v_y = -\frac{1}{eB} \frac{\partial V}{\partial x}$ como já foi utilizado na Eq. 13. Podemos então calcular a corrente gerada por esse potencial. Se esse potencial for uma ddp ΔP aplicada em duas bordas opostas da amostra, temos a corrente

$$I_y = -e \int v_y(k) \frac{dk}{2\pi} = \frac{e}{2\pi\hbar} \int \frac{\partial V(x)}{\partial x} dx = \frac{e}{2\pi\hbar} \Delta P \quad (25)$$

onde $\Delta P = eV_H$, e $\sigma_{xy} = I_y/V_H$, então $\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi\hbar}$ que é a condutividade para um nível de Landau preenchido. O ponto é que isso é verdade para qualquer potencial que for ligado no centro da amostra, contanto que tenha a diferença de potencial nas bordas. O estado desses elétrons que seguem em apenas uma direção são chamados modos de borda.

3.2 Estados localizados e estendidos

Nesse t3pico, devemos discutir o papel da desordem na forma33o dos plat33s. Resumidamente, segue abaixo o que a desordem causa no sistema do efeito Hall:

- A desordem levanta a degeneresc3ncia dos estados, de forma que os n3veis de Landau deixam de ser algo como na Fig. 3 e passam a ser mais parecidos com a Fig. 6;
- A desordem diminui a quantidade de estados estendidos na amostra, e aumenta a quantidade de estados localizados.

O motivo pelo qual a desordem levanta estados degenerados vem de teoria da perturba33o. Um potencial desordenado quebra simetrias que antes produziam as degeneresc3ncias, cada estado pode experienciar uma mudan3a diferente de energia a depender da sua posi33o espacial.

3.2.1 Operadores de centro de 3rbita

No efeito Hall cl3ssico, encontramos a trajet3ria dos el3trons sem o campo el3trico, vide Eq. 4. Os operadores de centro de 3rbita s3o ent3o definidos por

$$X = x(t) + R \sin(\omega_B t + \phi) = x - \frac{\dot{y}}{\omega_B} = x - \frac{\pi_y}{M\omega_B}$$

$$Y = y(t) - R \cos(\omega_B t + \phi) = y + \frac{\dot{x}}{\omega_B} = y + \frac{\pi_x}{M\omega_B}$$

e, quando aplicados sobre um estado, esses operadores devem resultar na localiza33o aproximada desse estado, ou ent3o, no caso cl3ssico, no centro de 3rbita da part3cula. Ambos claramente comutam com o Hamiltoniano sem a desordem, e sua rela33o de comuta33o 3 $[X, Y] = i l_B^2$.

A sua varia33o temporal em um sistema com o potencial desordenado V 3 dada por

$$i\hbar \dot{X} = [X, H + V] = [X, V] = [X, Y] \frac{\partial V}{\partial Y} = i l_B^2 \frac{\partial V}{\partial Y}$$

e, analogamente, $i\hbar \dot{Y} = -i l_B^2 \frac{\partial V}{\partial X}$. Se em uma determinada regi3o do sistema, V possuir um ponto de m3nimo, o estado ficaria localizado em uma equipotencial ao redor desse ponto. No sistema limpo, como foi visto na Se33o 2, na dire33o y , a fun33o de onda tem a forma de uma onda plana, ent3o espera-se uma condutividade cont3nua em acordo com a teoria cl3ssica ilustrada na linha azul pontilhada da Fig. 1, entretanto, o potencial visto pelos el3trons 3 rand3mico por conta da presen3a de impurezas/defeitos no material. Os efeitos de potenciais rand3micos em uma e duas dimens3es levam ao fen3meno da localiza33o

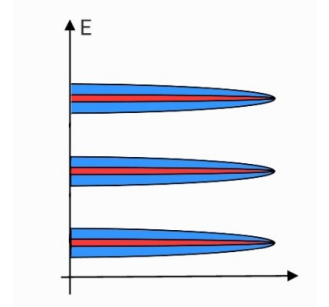


Figura 6 – Transforma33o de estados estendidos (vermelho) para localizados (azul).

de Anderson de todos os estados, de acordo com [7], devido a baixa probabilidade de interferência construtiva entre as funções de onda dos elétrons. Os platôs da condutividade então acontecem porque o preenchimento de estados localizados mantém a condutividade constante, já que estes não influenciam nos valores da condutividade, apenas os estados estendidos, de acordo com [3].

3.2.2 Fluxo Espectral revisitado

Deve-se mostrar agora que, apesar da desordem, os valores da condutividade e resistividade encontrados nos platôs são condizentes pela teoria. Para isso, consideremos um sistema como o da Fig. 7, onde temos os elétrons confinados a uma estrutura anelar por onde passa um campo magnético perpendicular a este, além de um fluxo magnético adicional confinado a um cilindro no centro do anel. O mesmo exercício de variar o fluxo de 0 até Φ_0 deve ser feito nesse caso, em um dado tempo $T \gg 1/\omega_B$, criando uma força eletromotriz $\varepsilon = -\Phi_0/T$ ao redor do anel, de forma que, no processo, n elétrons vão se deslocar do interior do anel para seu raio mais externo, criando uma corrente dada por $I_r = -ne/T$. Dessa forma, o valor da resistividade seria $\rho_{xy} = \frac{\varepsilon}{I_r} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{n}$, o que condiz com as predições. Agora é necessário provar que n elétrons se deslocaram do raio mais interno para o raio mais externo no processo.

Ainda não considerando a desordem, pela simetria do sistema, deve-se estudar o caso com *gauge* simétrico. Fazendo a substituição $z = x - iy = re^{i\phi}$, as funções de onda do nível de Landau mais baixo são dadas por

$$\psi_m = r^m e^{im\phi} e^{-r^2/(4l_B^2)}. \quad (26)$$

A função de onda de momento m é localizada pelo raio $r = \sqrt{2m}l_B$. Mas, pela análise do fluxo espectral, ao final do processo de variação do fluxo, a nova função de onda do estado é a função de onda do nível imediatamente superior, ou seja, a função de momento $m + 1$ que é fortemente localizada em $r = \sqrt{2(m+1)}l_B$. Dessa forma, se todos os estados do nível de Landau estiverem preenchidos, após um tempo T , um elétron se desloca do raio mais interno para o raio mais externo. Se n níveis de Landau estiverem completamente preenchidos, n elétrons serão deslocados.

O Hamiltoniano do caso com a desordem é dado por

$$H = \frac{1}{2M} \left[-\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eBr}{2} + \frac{e\Phi}{2\pi r} \right)^2 \right] + V(r, \phi) \quad (27)$$

Com uma transformação de *gauge*, podemos tentar anular o fluxo, por meio de $\psi(\theta, \phi) \rightarrow e^{ie\Phi\phi/(2\pi\hbar)} \psi(\theta, \phi)$, satisfazendo a condição de que $\psi(\theta, \phi) = \psi(\theta, \phi + 2\pi)$. Para

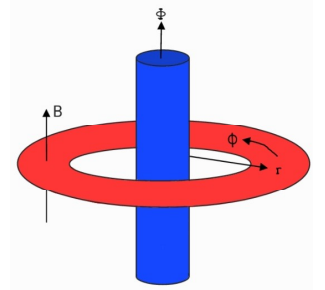


Figura 7 – Estrutura anelar com fluxo no centro.

os estados localizados, essa condição é sempre satisfeita, de forma que eles não são afetados pelo fluxo. Para os estados estendidos, essa condição só é satisfeita quando o fluxo é múltiplo de Φ_0 . Dessa maneira, a análise feita anteriormente ainda vale, porém apenas para os estados estendidos do nível de Landau.

3.3 Análise matemática da condutividade σ_{xy}

3.3.1 Teoria de perturbação para a condutividade

Primeiramente, faremos uma rápida passagem por teoria de perturbação apenas para trazer alguns resultados. O Hamiltoniano é dado por $H = H_0 + \Delta H$, onde H_0 é o Hamiltoniano não perturbado de um sistema com inúmeras partículas antes de ser ligado o campo elétrico dado por $\vec{E} = -\partial_t \vec{A}$, e $\Delta H = -\vec{J} \cdot \vec{A}$, onde \vec{J} é um operador associado com a corrente. Na resolução adiante, trataremos \vec{J} como o operador da densidade de corrente em prol da simplificação dos cálculos.

Também é considerado que o campo elétrico aplicado é da forma $\vec{E} = \vec{E}e^{-i\omega t}$, ou seja, um campo AC. Consequentemente, temos $\vec{A} = \frac{\vec{E}}{i\omega}e^{-i\omega t}$.

Por teoria de perturbação, sabemos que a evolução temporal dos estados ocorre por $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$ com $U(t, t_0) = Te^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \Delta H(t')dt'}$ e T é constante satisfazendo $i\hbar \frac{dU}{dt} = \Delta H U$ de modo que $U(t, t_0)$ seja unitário. Mais adiante, vamos considerar T como a identidade. Os operadores evoluem por meio de $\mathcal{O}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} \mathcal{O} e^{-iH_0 t/\hbar}$.

Considerando um sistemas com partículas no estado fundamental, inicialmente no momento $t_0 \rightarrow -\infty$, a evolução temporal do valor medido pela corrente se dá por

$$\begin{aligned} \langle \vec{J}(t) \rangle &= \langle 0(t) | \vec{J}(t) | 0(t) \rangle = \langle 0 | U^{-1}(t) \vec{J}(t) U(t) | 0 \rangle \\ &\approx \left\langle 0 \left| \left(1 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \Delta H(t') dt' \right) \vec{J}(t) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \Delta H(t') dt' \right) \right| 0 \right\rangle \\ &\approx \langle 0 | \vec{J}(t) | 0 \rangle + \left\langle 0 \left| \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t [\Delta H(t'), \vec{J}(t)] dt' \right| 0 \right\rangle \end{aligned}$$

onde expandimos o operador $U(t, t_0)$ em Taylor e consideramos apenas os primeiros termos da série. O primeiro termo do lado direito da equação é a corrente na ausência do campo elétrico, a qual será considerada nula. O sistema é invariante por translação temporal, dessa forma, podemos fazer uma substituição de variáveis em termos de $t'' = t - t'$. Logo, substituindo o valor de ΔH , temos, para cada componente de \vec{J} ,

$$\langle \vec{J}_i(t) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\int_0^\infty e^{i\omega t''} \langle 0 | [\vec{J}_j(0), \vec{J}_i(t'')] | 0 \rangle dt'' \right) E_j e^{-i\omega t} \quad (28)$$

com $i, j = x, y$. Logo, temos para a condutividade, o valor de

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle 0 | [\vec{J}_y(0), \vec{J}_x(t)] | 0 \rangle dt \quad (29)$$

Essa é chamada a fórmula de Kubo para a condutividade. A fórmula de Kubo é uma expressão que representa como as medidas de um certo observável mudam sob influência de alguma força perturbativa no sistema .

Evoluindo o operador \vec{J} no tempo, temos

$$\sigma_{xy}(\omega) = \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^\infty e^{i\omega t} \sum_n (\langle 0|J_y|n\rangle \langle n|J_x|0\rangle e^{-i(E_0-E_n)t/\hbar} - \langle 0|J_x|n\rangle \langle n|J_y|0\rangle e^{-i(E_n-E_0)t/\hbar}) dt \quad (30)$$

Note que os operadores já foram projetados em uma base $|n\rangle$ completa de autoestados do Hamiltoniano não perturbado. Repare que os estados $|n\rangle = |0\rangle$ não contribuem para o somatório. Podemos fazer a aproximação para o caso DC em que $\omega \rightarrow 0$: $\frac{1}{\hbar\omega + E_n - E_0} \approx \frac{1}{E_n - E_0} - \frac{\hbar\omega}{(E_n - E_0)^2} + \mathcal{O}(\omega^2)$. O primeiro termo do lado direito da equação acaba por desaparecer, pelo fato do sistema ser invariante por rotação, ou seja, deve ser invariante sob a transformação $x \rightarrow y$ e $y \rightarrow -x$, levando a

$$\sum_n \langle 0|J_y|n\rangle \langle n|J_x|0\rangle + \langle 0|J_x|n\rangle \langle n|J_y|0\rangle = 0$$

de modo que, integrando a Eq. 30, chegamos em

$$\sigma_{xy} = i\hbar L_x L_y \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0|J_y|n\rangle \langle n|J_x|0\rangle - \langle 0|J_x|n\rangle \langle n|J_y|0\rangle}{(E_0 - E_n)^2}. \quad (31)$$

onde a correção de corrente para densidade de corrente já foi feita, através da multiplicação pelas dimensões da amostra retangular de lados L_x e L_y .

3.3.2 Topologia do efeito Hall

Voltando para a análise do efeito Hall, consideremos nosso sistema localizado em um Toro espacial formado pelo dobramento do retângulo de lados L_x e L_y , de forma que temos algumas condições de contorno a mais para as funções de onda. Definimos os operadores de translação magnéticos como $\vec{T}(\vec{d}) = e^{-i\vec{d} \cdot (i\nabla + e\vec{A}/\hbar)}$, de forma que $T_x = T(\vec{d} = (L_x, 0))$ e $T_y = T(\vec{d} = (0, L_y))$.

As novas condições de contorno então devem ser $T_x\psi(x, y) = \psi(x, y)$ e $T_y\psi(x, y) = \psi(x, y)$, utilizando então o *gauge* de Landau, temos

$$T_x\psi(x, y) = \psi(x + L_x, y) \quad \text{e} \quad T_y\psi(x, y) = e^{-ieBL_yx/\hbar}\psi(x, y + L_y). \quad (32)$$

Repare que essas não são as condições de contorno usuais $\psi(x, y) = \psi(x, y + L_y)$, e essas equações não são consistentes para qualquer escolha B , visto que $T_yT_x = e^{-ieBL_xL_y/\hbar}T_xT_y$, contudo, ao aplicarmos T_xT_y precisamos chegar no mesmo estado após aplicarmos T_yT_x , o que só é verdade se $\frac{eBL_xL_y}{\hbar} \in 2\pi\mathbb{Z}$. Repare que essa relação representa uma quantização do fluxo magnético em termos de Φ_0

Agora, analisaremos o sistema perturbado. A vantagem que temos de estarmos enxergando a nossa amostra como um Toro, ao invés de um retângulo, é que podemos inserir diferentes fluxos magnéticos no nosso sistema, os quais serão utilizados para a teoria de perturbação, como mostra a Fig. 8.

O novo potencial vetor, portanto, (lembrando que estamos usando o *gauge* de Landau) é da forma $\vec{A} = \left(\frac{\Phi_x}{L_x}, \frac{\Phi_y}{L_y} + Bx, 0\right)$.

Topologicamente, essa sistematização de fluxos pode ser substituída pela visualização da Fig. 9(a); lembrando que, nessa representação, o fluxo Φ_x , por exemplo, pode se encontrar contornando qualquer circunferência vertical do Toro, não especificamente a da imagem; analogamente para Φ_y . Então, utilizando a nova visualização, corta-se o toro na parte serrilhada.

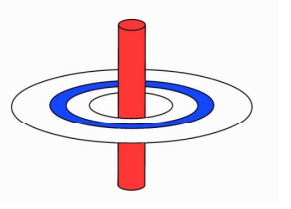


Figura 8 – Fluxos perturbativos Φ_y em azul e Φ_x em vermelho.

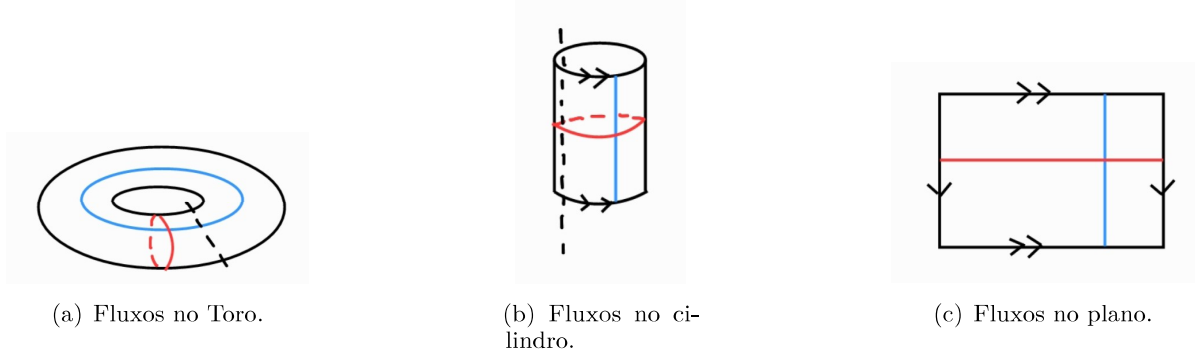


Figura 9 – Nova visão dos fluxos Φ_y em azul e Φ_x em vermelho.

Obtém-se algo como a Fig. 9(b), onde as setas nas bordas indicam a direção à qual elas estão orientadas ao utilizarmos sua relação de equivalência, como explicado em [6]. Então, novamente, cortá-se o cilindro na parte serrilhada.

Obtém-se então algo como a Fig. 9(c) mostra. O fluxo Φ_x é de um campo que cruza a amostra (em todos os pontos da amostra) na direção em vermelho, e Φ_y é de um campo que cruza a amostra na direção em azul. As bordas com uma seta seriam as de comprimento L_x e com duas setas teriam comprimento L_y .

Assim como no caso do fluxo espectral, o espectro do sistema é invariante para transformações de Φ_x e Φ_y múltiplas do quantum de fluxo. Dessa forma, a perturbação do Hamiltoniano é dada por $\Delta H = -\sum_{i=x,y} \frac{J_i \Phi_i}{L_i}$. Por teoria de perturbação, o novo estado fundamental é dado por

$$|\psi_0\rangle' = |\psi_0\rangle + \sum_{n \neq \psi_0} \frac{\langle n | \Delta H | \psi_0 \rangle}{E_n - E_0} |n\rangle. \quad (33)$$

Estamos interessados em repetir o procedimento do caso do fluxo espectral, então vamos variar Φ_i . Derivando a Eq. 33, temos

$$\left\langle \frac{\partial \psi_0}{\partial \Phi_i} \right\rangle = -\frac{1}{L_i} \sum_{n \neq \psi_0} \frac{\langle n | J_i | \psi_0 \rangle}{E_n - E_0} |n\rangle. \quad (34)$$

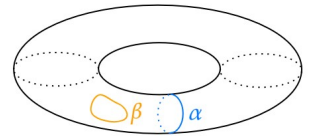


Figura 10 – Caminho trivial (em laranja) e não trivial (em azul) em um Toro.

Substituindo esses valores na Eq. 31, temos

$$\sigma_{xy} = i\hbar \left(\left\langle \frac{\partial\psi_0}{\partial\Phi_y} \middle| \frac{\partial\psi_0}{\partial\Phi_x} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial\psi_0}{\partial\Phi_x} \middle| \frac{\partial\psi_0}{\partial\Phi_y} \right\rangle \right) = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial\Phi_y} \langle \psi_0 | \frac{\partial\psi_0}{\partial\Phi_x} \rangle - \frac{\partial}{\partial\Phi_x} \langle \psi_0 | \frac{\partial\psi_0}{\partial\Phi_y} \rangle \right). \quad (35)$$

Como o importante não são os fluxos Φ_i , e, sim, o resto da divisão de Φ_i por Φ_0 , o espaço formado por esses fluxos é um Toro \mathbf{T}_{Φ}^2 diferente do Toro já mencionado formado pelas coordenadas espaciais. Parametrizemos então \mathbf{T}_{Φ}^2 com as coordenadas $\theta_i = \frac{2\pi\Phi_i}{\Phi_0}$ com $\theta_i \in [0, 2\pi)$. Então, a conexão de Berry para a variação desses parâmetros e sua respectiva curvatura são dadas por

$$\mathcal{A}_i(\vec{\Phi}) = -i \left\langle \psi_0 \middle| \frac{\partial}{\partial\theta_i} \middle| \psi_0 \right\rangle \quad \text{e} \quad \mathcal{F}_{xy} = -i \left(\frac{\partial}{\partial\theta_y} \langle \psi_0 | \frac{\partial\psi_0}{\partial\theta_x} \rangle - \frac{\partial}{\partial\theta_x} \langle \psi_0 | \frac{\partial\psi_0}{\partial\theta_y} \rangle \right). \quad (36)$$

Substituindo o valor da curvatura na Eq. 35, obtemos $\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar} \mathcal{F}_{xy}$. Supondo que a condutividade é na verdade a média desse valor sobre todos os fluxos, de forma que temos que na verdade integrar a curvatura de Berry sobre todo \mathbf{T}_{Φ}^2 :

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar} \int_{\mathbf{T}_{\Phi}^2} \mathcal{F}_{xy} \frac{d^2\theta}{(2\pi)^2} = -\frac{e^2}{2\pi\hbar} C \quad (37)$$

onde C é conhecido como primeiro número de Chern, dado por $C = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbf{T}_{\Phi}^2} \mathcal{F}_{xy} d^2\theta$. A princípio, diríamos que $C = 0$, visto que, como \mathbf{T}_{Φ}^2 é uma superfície fechada, podemos usar o teorema de Gauss pelo volume interior de \mathbf{T}_{Φ}^2 , de forma que o integrando é nulo, já que seria o divergente de um rotacional. Contudo, a conexão de Berry não é invariante por transformações de *gauge*, de forma que, para uma transformação $\mathcal{A}_i \rightarrow \mathcal{A}_i + \partial_i\omega$, onde ω é uma função qualquer, o número de Chern é dado por

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbf{T}_{\Phi}^2} (\vec{\mathcal{A}} + \nabla\omega) ds = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbf{T}_{\Phi}^2} \nabla\omega ds$$

onde ds representa o infinitesimal de uma curva, e foi usado na segunda igualdade que a integral do *gauge* original é nula. A última integral da Eq. 3.3.2 também seria nula se calculada em um caminho fechado qualquer trivial de \mathbf{T}_{Φ}^2 , como a curva β na Fig. 10, a qual pode ser deformada em um ponto. Porém, uma curva não trivial, como a α não pode ser deformada em um ponto, de forma que o resultado da integral é dado por $2\pi n$, onde n é o número de voltas que o caminho faz no Toro, de forma que $C \in \mathbb{Z}$.

Esse resultado então condiz experimentalmente para o que é encontrado para σ_{xy} . O número de Chern é um invariante topológico, o que significa que ele é o mesmo para espaços homeomorfos.

4 PROBLEMA NA REDE QUADRADA

O Hamiltoniano segundo quantizado pelo modelo de *tight binding*⁴ para elétrons em uma rede quadrada de parâmetro a , sem desordem e sem considerar o spin das partículas,

⁴ Ou seja, considerando autoestados restritos a sítios de uma rede.

com o campo magnético perpendicular, é dado por

$$H = -t \sum_{m,n} (e^{ieaA_1(\mathbf{x})/\hbar} |m+1, n\rangle \langle m, n| + e^{ieaA_2(\mathbf{x})/\hbar} |m, n+1\rangle \langle m, n| + h.c.). \quad (38)$$

onde $\mathbf{x} = (ma, na)$ e t é o termo de hopping entre um sítio e outro. Para a tradução do Hamiltoniano do modelo de *tight binding* usual para esse Hamiltoniano, usa-se o método da substituição de Peierls, vide [4], o qual afirma que, para elétrons em uma rede na presença de um potencial vetor que varia pouco espacialmente, os operadores de translação na rede são substituídos por

$$T_x = e^{i\theta_{m,n}^x} |m+1, n\rangle \langle m, n| \quad \text{e} \quad T_y = e^{i\theta_{m,n}^y} |m, n+1\rangle \langle m, n| \quad (39)$$

onde $\theta_{m,n}^x = \frac{e}{\hbar} \int_m^{m+1} A_1(x, n) dx$ e $\theta_{m,n}^y = \frac{e}{\hbar} \int_n^{n+1} A_2(m, y) dy$. Como o potencial vetor é quase constante em um sítio, usamos a aproximação

$$\theta_{m,n}^x \approx \frac{e}{\hbar} a A_1(\mathbf{x}), \quad \theta_{m,n}^y \approx \frac{e}{\hbar} a A_2(\mathbf{x}). \quad (40)$$

Fazendo a substituição, temos que o Hamiltoniano resultante é dado pela Eq. 38. Restringindo o problema para campo magnético constante de valor B na vertical, podemos usar novamente o *gauge* de Landau, ou seja, $A_1 = 0$ e $A_2 = Bx$. Resolvendo a equação de Schrödinger para um estado qualquer de momento $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{i,j} a_{i,j,\mathbf{k}} |i, j\rangle$, obtemos a equação

$$a_{m+1,n,\mathbf{k}} + a_{m-1,n,\mathbf{k}} + e^{-\frac{i}{\hbar} e B a^2 m} a_{m,n+1,\mathbf{k}} + e^{\frac{i}{\hbar} e B a^2 m} a_{m,n-1,\mathbf{k}} = \frac{E(\mathbf{k})}{t} a_{m,n,\mathbf{k}} \quad (41)$$

onde foi utilizado $x = ma$. O *gauge* de Landau possibilita que os coeficientes sejam reescritos por separação de variáveis através de $a_{m,n,\mathbf{k}} = e^{i\nu n} g_m$. O fluxo magnético em um sítio, dado por $\Phi = Ba^2$, de acordo com [5], pode ser parametrizado em função do quantum de fluxo:

$$\Phi = \frac{p}{q} \Phi_0 \quad (42)$$

onde $p, q \in \mathbb{N}$, $p \leq q$ e $\text{mdc}(p, q) = 1$. A equação secular é, então, dada por

$$g_{m+1} + g_{m-1} + 2 \cos \left(2\pi m \frac{p}{q} - \nu \right) g_m = \frac{E}{t} g_m \quad (43)$$

Reescrevendo na forma de matriz, temos:

$$\begin{pmatrix} g_{m+1} \\ g_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E}{t} - 2 \cos \left(2\pi m \frac{p}{q} - \nu \right) & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_m \\ g_{m-1} \end{pmatrix} \quad (44)$$

A parametrização dada na Eq. 42 é conveniente para a periodicidade em m da matriz em Eq. 44, com período q . Dessa forma, podemos impor as condições de contorno seguindo o teorema de Bloch:

$$g_{m+q} = e^{iaqk_x} g_m \quad (45)$$

O número ν estaria relacionado com o número quântico k_y , o qual varia através de $[-\frac{\pi}{qa}, \frac{\pi}{qa}]$, por conta do campo magnético, diferente de k_x , que varia por $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$. A Fig. 11 representa a diagonalização do sistema em função do fluxo. Nota-se q bandas de energia para $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{p}{q}$.

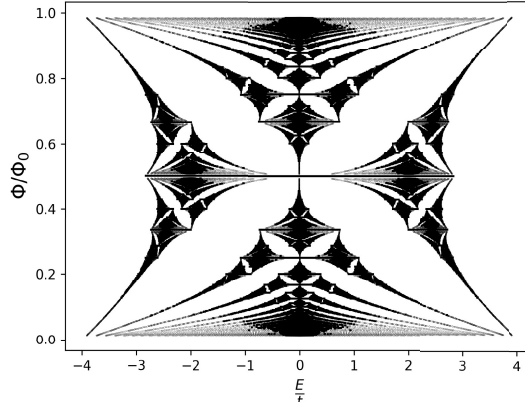


Figura 11 – Autoenergias da rede em função do fluxo magnético.

4.1 Localização de Anderson em sistemas unidimensionais

Agora, vamos considerar o *tight binding* para um sistema unidimensional, o Hamiltoniano segundo-quantizado para o modelo de é dado por

$$H = \sum_n [\epsilon_n |n\rangle \langle n| - t(|n+1\rangle \langle n| + h.c.)] \quad (46)$$

O primeiro termo na somatória refere-se a energia do sítio, enquanto o segundo é o termo de *hopping*, que representa a possibilidade da transição da partícula de um sítio para os seus vizinhos. Um potencial desordenado pode ser atribuído a aleatoriedade dos coeficientes ϵ_n , por exemplo. O fenômeno da localização de Anderson trata da localização de estados do sistema o aumento da amplitude de desordem; no caso da ausência da desordem, temos estados estendidos.

Um modo de estudarmos a localização de estados do sistema é por meio da localização dos autoestados, dados, em geral, por $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\xi} e^{\frac{\vec{r}-\vec{r}_0}{\xi}}$, onde ξ é o comprimento de localização; isso pode ser feito através da quantidade chamada *inverse participation ratio*, calculada por $IPR = \sum_{j=1}^L |a_{j,k}|^4$, onde $|\phi_k\rangle = \sum_{j=1}^L a_{j,k} |j\rangle$ é um autoestado para o sistema e L é o seu tamanho. O IPR de um autoestado localizado tende a uma constante proporcional ao inverso do comprimento de localização do estado, conforme mudamos o tamanho do sistema, e quanto maior o IPR , mais localizado seria esse estado. Para um estado perfeitamente estendido sobre toda a rede, teríamos $a_{j,k} = 1/\sqrt{L}$ para $j = 1, \dots, L$, de modo que, para autoestados estendidos temos $IPR \propto 1/L$.

Resolvendo a equação de Schrödinger para o Hamiltoniano em Eq. 46, obtemos a equação secular

$$Ea_n = \epsilon_n a_n - ta_{n-1} - ta_{n+1} \quad (47)$$

que pode ser reescrita na forma matricial, utilizando condições periódicas de contorno. Utilizando um método computacional de diagonalização, e variando ϵ_n através de uma distribuição uniforme $[-W, W]$, onde W é o parâmetro de desordem, obtemos o resultado ilustrado na Fig. 12(a). Observe que para cada valor distinto de L , o inverso da média do IPR permanece constante, indicando a localização dos estados, enquanto, no caso limpo, a $\langle \frac{1}{L \cdot IPR} \rangle$ permanece constante, o que mostra que os estados são estendidos.

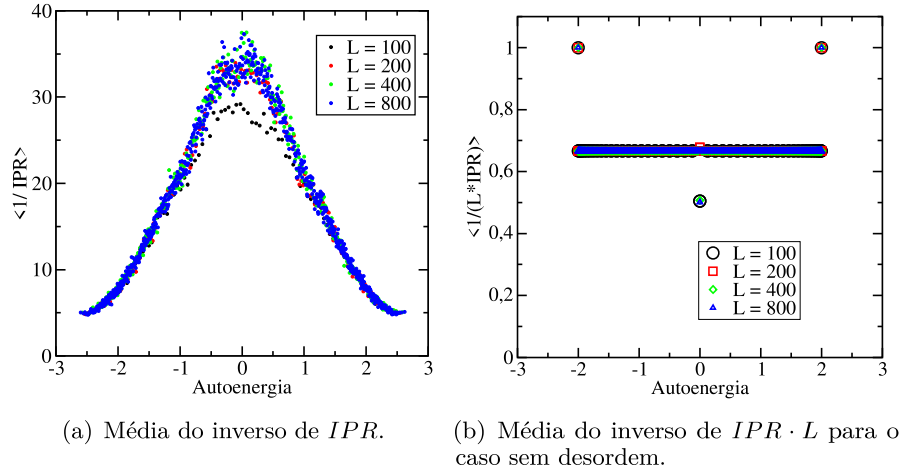


Figura 12 – IPR para cada autoestado da rede.

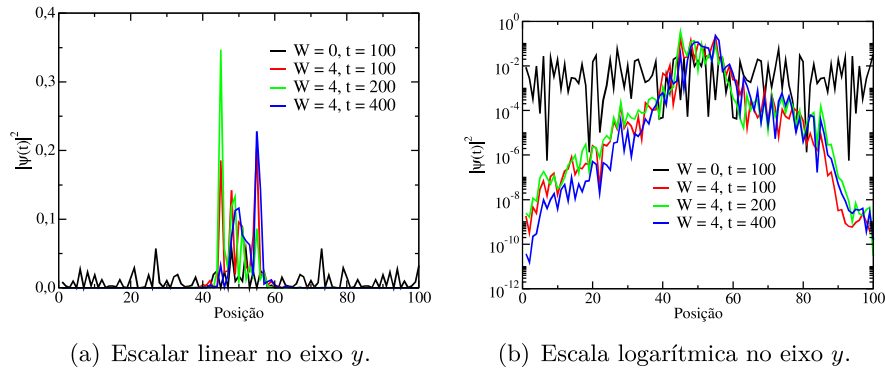


Figura 13 – Densidade de probabilidade em escala em função da posição na rede, o caso limpo foi implementado apenas para $t = 100$, quando já estava estendido, e o caso desordenado com $W = 4$ foi implementado para três instantes diferentes.

Outro meio de análise sobre a localização dos estados é feito a partir da evolução temporal de um estado inicialmente localizado. Na Fig. 13(a), temos a densidade de probabilidade distribuída pela rede em um instante $t = 100$ de um estado que, em $t = 0$, estava localizado no sítio central, para $W = 0$ e para $W = 4$. Perceba que, para o caso com desordem, o estado continua localizado, em comparação ao caso sem desordem. Esse resultado fica mais evidente na Fig. 13(b).

5 CONCLUSÃO

O objetivo deste trabalho foi introduzir conceitos fundamentais da física da matéria condensada, com foco no efeito Hall quântico inteiro. Foram calculados os autoestados e

autoenergias do Hamiltoniano com campo magnético em dois *gauges* distintos, destacando a semelhança com o oscilador harmônico quântico. Discutiu-se a fase geométrica de Berry e o conceito de quantum de fluxo, o qual diz respeito a uma maneira quantizada de incrementar fluxo ao sistema, ressaltando sua utilidade na parametrização do fluxo magnético em uma rede. A formação de platôs de resistividade no efeito Hall foi explicada pela transição de estados estendidos para estados localizados devido à desordem, que também levanta a degenerescência dos níveis de Landau, impactando a condutividade em sistemas com topologia de Toro. O trabalho também abordou os estados de borda, que surgem para todos os níveis de Landau de maneira independente da desordem, e introduziu o fenômeno da localização de Anderson, mostrando como a desordem afeta a natureza dos estados, tornando-os localizados.

REFERÊNCIAS

1. TONG, D. **Lectures on the Quantum Hall Effect**. arXiv:1606.06687, 2016.
2. GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. **Introduction to Quantum Mechanics**. 3. ed. Cambridge University Press, 2018.
3. ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. New York: Cengage Learning, USA, 1976.
4. KOHN, W. **Theory of Bloch Electrons in a Magnetic Field: The Effective Hamiltonian**. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 115, 1959. p. 1460–1478.
5. HOFSTADTER, D. R. **Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields**. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 14, 1976. p. 2239–2249.
6. MUNKRES, J. R.. **Topology: A First Course**. Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1975.
7. ABRAHAMS, E. et al. **Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions**. Physical Review Letters, v. 42, n. 10, 1979. p. 673–676.