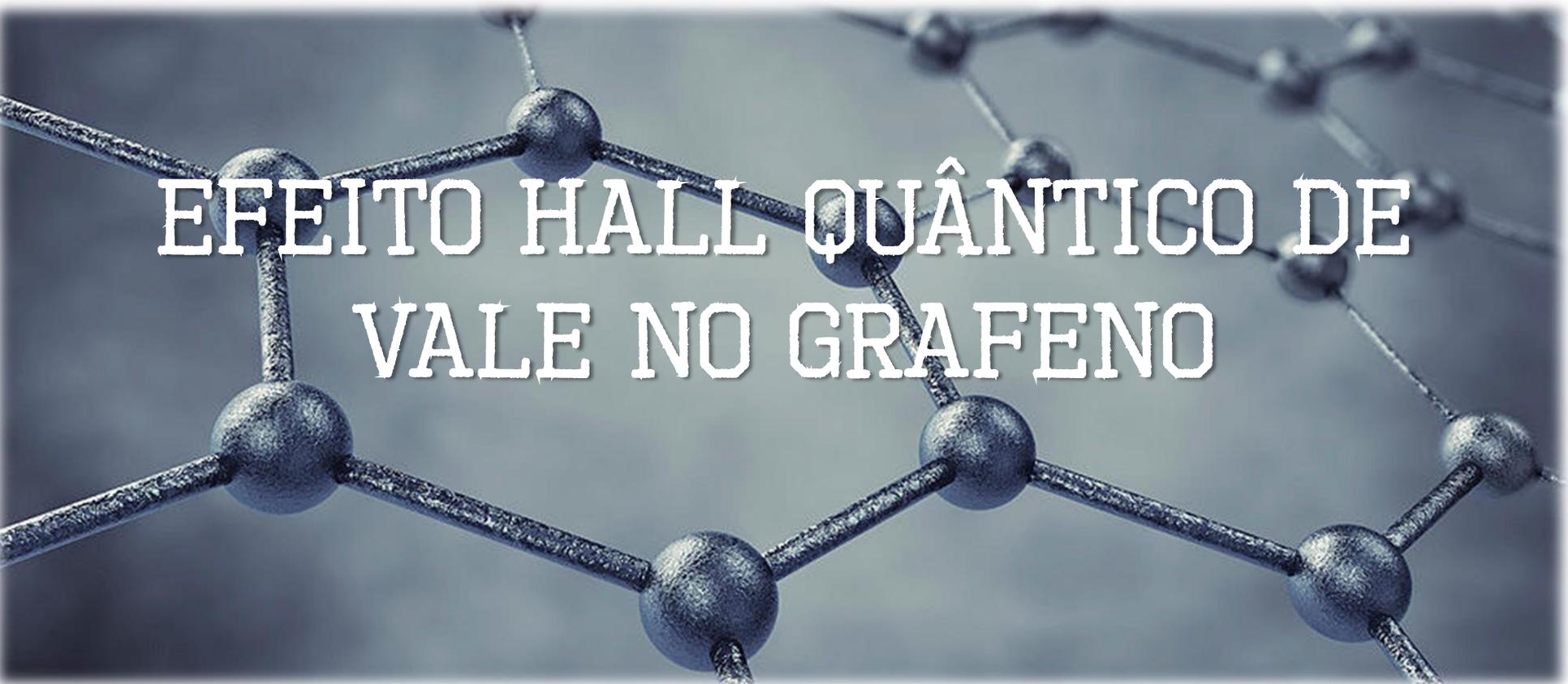


UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA DE MATERIAIS



EFEITO HALL QUÂNTICO DE VALE NO GRAFENO

WALACE DE SOUSA ELIAS

DISCIPLINA: TEORIA QUÂNTICA DE MUITOS CORPOS

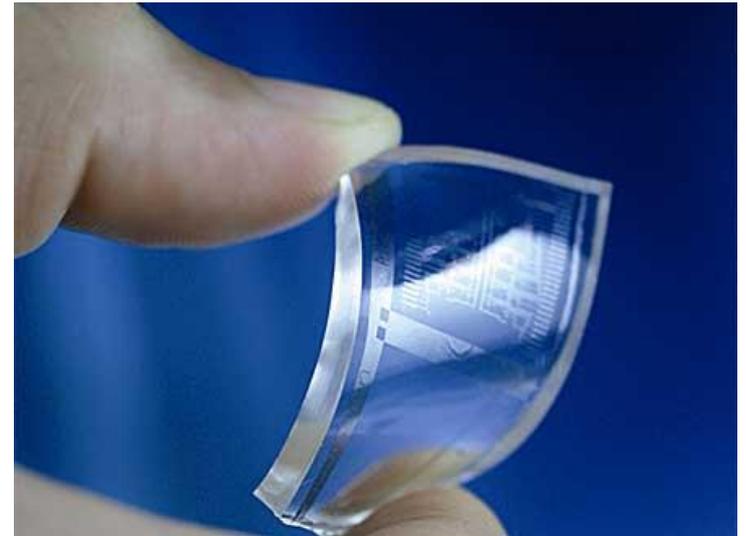
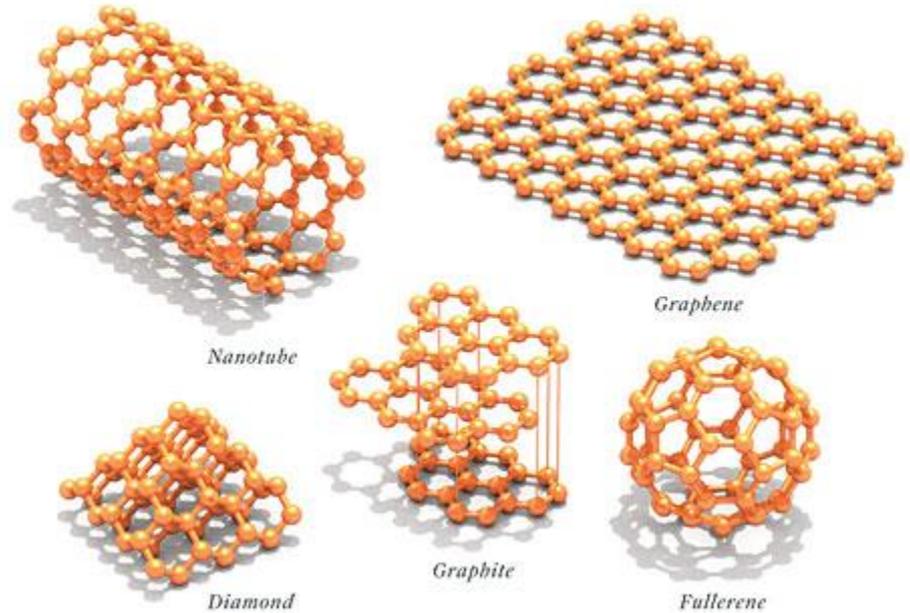
PROF. DR. LUIS GREGÓRIO DIAS

INTRODUÇÃO

O **grafeno** é uma das formas cristalinas do **carbono**, assim como o **diamante**, o **grafite**, os **nanotubos de carbono** e **fulerenos**.

É o material mais forte já demonstrado, consistindo em uma folha plana de átomos de carbono densamente compactados em uma grade de duas dimensões.

O grafeno de alta qualidade é muito forte, leve, quase transparente, um excelente condutor de calor e eletricidade.



A realização experimental do grafeno abriu uma possibilidade fascinante de observações em física da matéria condensada, com um número de efeitos interessantes, antes considerados apenas ocorrer, exclusivamente, em física de partículas.

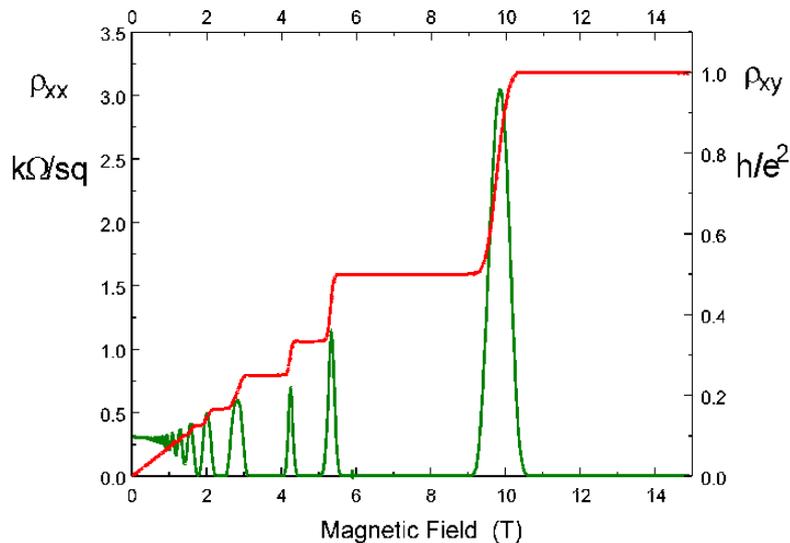
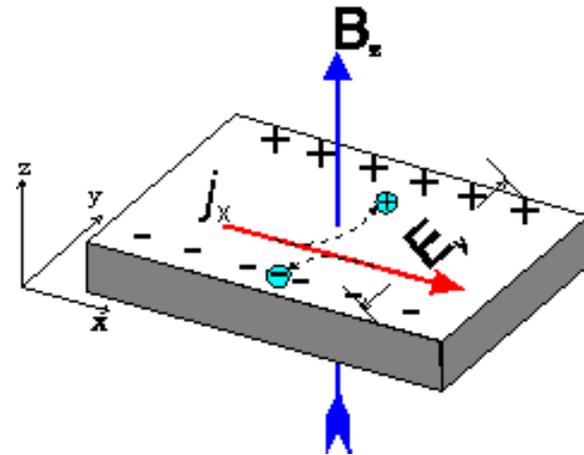
O grafeno exhibe alguns fenômenos de transportes não convencionais, dentre eles:

- Efeito Hall Quântico inteiro anômalo;
- Condutividade dc σ finita, mesmo na ausência de um campo elétrico externo, $\vec{E} = 0$.
- Possibilidade de observar uma condutividade transversa quantizada.

O QUE É O EFEITO HALL QUÂNTICO?

Em 1879, durante experiências feitas para se medir diretamente o sinal dos portadores de carga em um condutor Edwin H. Hall percebeu um fenômeno peculiar.

Edwin Hall descreveu foi o surgimento de regiões com carga negativa e outras com carga positiva no condutor, criando um campo magnético perpendicular ao campo gerado pela corrente principal.



Uma manifestação ainda mais marcante de efeitos quânticos nas propriedades de transporte de um gás de elétrons bidimensional foi observada 50 anos mais tarde com a descoberta do efeito Hall quântico inteiro. Esse efeito consiste na quantização da resistência Hall, não mais linear em como previsto classicamente

MODELO

Os elétrons \mathbf{p} do átomo de carbono na rede hexagonal do grafeno são usualmente descritos por férmions sem massa de **4** componentes, sendo cada componente correspondendo a duas sub-redes (**A** e **B**) e dois vales (valley) (**K** e **K'**).

Desconsiderando a interação entre os vales, podemos descrever o sistema como dois férmions de **2** componentes.

Assumindo que a interação entre os férmions em 2D seja eletromagnética, isto é, uma interação coulombiana, um modelo para se utilizar será a lagrangeana da Pseudo Eletrodinâmica Quântica (PQED)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{4} F_{\mu\nu} \left[\frac{2}{\sqrt{-\square}} \right] F^{\mu\nu} + i \bar{\Psi}_a \not{\partial} \Psi_a + j^\mu A_\mu \quad (a = 1, \dots, N_f)$$

com

$$i \not{\partial} = i \gamma^0 \partial_0 + i v_F \gamma^i \partial_i \quad j^\mu = e \bar{\Psi}_a \gamma^\mu \Psi_a = e (\bar{\Psi}_a \gamma^0 \Psi_a, v_F \bar{\Psi}_a \gamma^i \Psi_a)$$



A PQED foi proposta por Marino, como uma alternativa para estudar interações entre férmions em sistemas bidimensionais. Em seu trabalho, realizando uma redução dimensional, obteve um modelo para férmions bidimensionais interagindo através de um potencial do tipo Coulomb.

Nuclear Physics B408 (1993) [FS] 551–564
North-Holland

NUCLEAR
PHYSICS B [FS]

Quantum electrodynamics of particles on a plane and the Chern–Simons theory

E.C. Marino¹

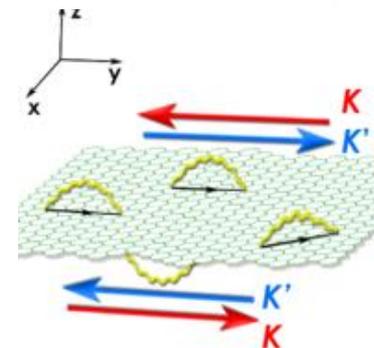
Joseph Henry Laboratories, Princeton University, Princeton, NJ 08544, USA

Received 6 January 1993

Accepted for publication 7 July 1993

We study the electrodynamics of generic charged particles (bosons, fermions, relativistic or not) constrained to move on an infinite plane. An effective gauge theory in $(2 + 1)$ -dimensional space-time which describes the real electromagnetic interaction of these particles is obtained. The relationship between this effective theory with the Chern–Simons theory is explored. It is shown that the QED lagrangian per se produces the Chern–Simons constraint relating the current to the effective gauge field in $2 + 1$ dimensions. It is also shown that the geometry of the system unavoidably induces a contribution from the topological θ -term that generates an explicit Chern–Simons term for the effective $(2 + 1)$ -dimensional gauge field as well as a minimal coupling of the matter to it. The possible relation of the effective three-dimensional theory with the bosonization of the Dirac fermion field in $2 + 1$ dimensions is briefly discussed as well as the potential applications in condensed matter systems.

Em sistemas bidimensionais, como é o caso do grafeno, é sabido que a interação eletromagnética, descrita pela QED, é do tipo logarítmica. Na PQED, por outro lado, a interação é do tipo coulombiana.



FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO CORRENTE-CORRENTE

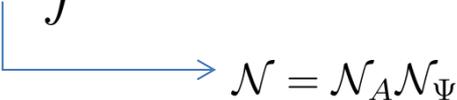
Determinamos no limite de $\omega \rightarrow 0$, a condutividade ótica no grafeno utilizando a fórmula de **Kubo**, que descreve a resposta linear de um campo elétrico externo estático. No formalismo de tempo real, temos

$$\sigma^{ik} = \lim_{\substack{\omega \rightarrow 0 \\ \vec{p} \rightarrow 0}} \frac{i \langle j^i j^k \rangle}{\omega}$$

onde a função de correlação corrente-corrente contém apenas os diagramas 1PI.

Uma forma mais usada para se obter as funções de correlação, se dá a partir do funcional gerador correspondente.

$$\mathcal{Z} = \mathcal{N} \int DA_\mu D\bar{\Psi} D\Psi e^{-\int d^3x (\mathcal{L} + e j^\mu J_\mu)}$$

 $\mathcal{N} = \mathcal{N}_A \mathcal{N}_\Psi$

O gerador das funções de correlação conectadas é determinado por

$$W[J] = -\ln \mathcal{Z}[J]$$

O gerador funcional das funções de correlação 1PI é então obtido por uma transformação de Legendre do tipo

$$\Gamma[A_c^\mu] = \int d^3x J_\mu(x) A_c^\mu - W[J]$$

com

$$A_c^\mu(x) = \frac{\delta W[J]}{\delta J_\mu(x)}$$

A função de correlação corrente-corrente pode ser finalmente obtida, como sendo a segunda derivada do funcional gerador $\Gamma[A_c]$:

$$\langle j_\mu j_\nu \rangle = \frac{1}{e^2} \frac{\delta^2 \Gamma[A_c]}{\delta A_c^\mu \delta A_c^\nu} \Big|_{A_c=0}$$

Porém, a expressão anterior nada mais é que a auto energia do campo de gauge A_μ , também conhecido como tensor de polarização

$$G_{\mu\nu}^{-1} - G_{0,\mu\nu}^{-1} = -e^2 \Pi_{\mu\nu}$$

O propagador livre do campo de gauge é facilmente obtido a partir da lagrangeana e escrito como

$$G_{0,\mu\nu}^{-1} = \frac{1}{2\sqrt{-p^2}} P_{\mu\nu} \longrightarrow P_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} - p_\mu p_\nu / p^2$$

Portanto, imediatamente relacionamos a função de correlação corrente-corrente com a auto energia de A_μ , isto é,

$$\langle j_\mu j_\nu \rangle_{1\text{PI}} = \Pi_{\mu\nu}$$

O cálculo da auto energia do campo de gauge é bem conhecido em ordens superiores a dois *loops* para a QED. A contribuição de um *loop* no espaço euclidiano para um férmion sem massa é o mesmo resultado obtido pela Eletrodinâmica Quântica e dada por

$$\Pi_{\mu\nu}^{(1)} = -\frac{-\sqrt{p^2}}{16} P_{\mu\nu} + \frac{1}{2\pi} (n + 1/2) \epsilon_{\mu\nu\alpha} p^\alpha$$

A contribuição em ordem de dois *loops* é exclusiva da PQED e para um férmion simples e sem massa, obtêm-se o seguinte resultado

$$\Pi_{\mu\nu}^{(2)} = -\frac{\sqrt{p^2}}{16} C_\alpha \alpha_g P_{\mu\nu}$$



$C_\alpha \approx 0.056$

$\alpha_g \approx 300/137 = 2.189$

A função de correlação corrente-corrente 1PI será então determinada por

$$\langle j_\mu j_\nu \rangle_{1\text{PI}} = j_1(p) P^{\mu\nu} + j_2 \epsilon^{\mu\nu\alpha} p_\alpha$$

$$j_1(p) = N_f \frac{\sqrt{p^2}}{16} [1 + C_\alpha \alpha_g + \mathcal{O}(e^4)]$$

$$j_2 = -N_f \frac{1}{2\pi} (n + 1/2)$$

Determinada a função de correlação corrente-corrente, **“façamos física”!**

CONDUTIVIDADE ($T = 0, \omega \rightarrow 0$)

A condutividade ótica no limite de $T = 0, \omega \rightarrow 0$ pode ser obtido usando a fórmula de Kubo, isto é,

$$\sigma^{ik} = \lim_{\substack{\omega \rightarrow 0 \\ \vec{p} \rightarrow 0}} \frac{i \langle j^i j^k \rangle_{\text{ret}}}{\omega} = \sigma_{xx} \delta^{ik} + \sigma_{xy} \epsilon^{ik}$$

Quando calculamos a função de correlação corrente-corrente neste regime, devemos repassar $\gamma_i \rightarrow v_F \gamma_i$, nos vértices. Dessa forma, as contribuições da auto energia do campo de gauge serão escritas como

$$\Pi^{00}(p_0, \vec{p}) = -\frac{1}{16} \frac{\vec{p}^2}{\sqrt{v_F^2 \vec{p}^2 + p_0^2}} \quad \Pi^{0i}(p_0, \vec{p}) = -\frac{1}{16} \frac{p_0 p^i}{\sqrt{v_F^2 \vec{p}^2 + p_0^2}} + \frac{1}{2\pi} \left(n + \frac{1}{2} \right) \epsilon^{i0j} p_j$$

$$\Pi^{0i}(p_0, \vec{p}) = -\frac{1}{16} \frac{\delta^{ij} (p_0^2 + v_F^2 \vec{p}^2) - v_F^2 p^i p^j}{\sqrt{v_F^2 \vec{p}^2 + p_0^2}} + \frac{1}{2\pi} \left(n + \frac{1}{2} \right) \epsilon^{ij0} p_0$$

A função de correlação corrente-corrente será expressa em termos de Π_{ij} , Π_{00} e Π_{i0} .

Tomando o limite de $\vec{p} \rightarrow 0$, na fórmula de Kubo, a única contribuição virá do termo Π_{ij} .

A função de correlação é proporcional ao número de sabor N_f , composto pelos spins \uparrow, \downarrow e nos valores K e K' , portanto $N_f = N_S + N_V$.

Devemos ter cuidado, no entanto, quando somar as contribuições dos vales K e K' . Por razões de simetria, é razoável esperar que ambos os vales irão contribuir de forma idêntica.

No entanto, os vales são ligados uns aos outros por *time reverso symmetry* (TRS) e, conseqüentemente, a sua contribuição dependerá do fato desta simetria ser espontaneamente quebrada ou não.

Quando a simetria de TR preservada, ambos os vales dão claramente contribuições idênticas e $N_V = 2$ ou $N_V = 4$.

Na teoria da resposta linear, para cada vale têm-se que

$$\langle 0|j^i|0\rangle_K = \frac{i\langle 0|j_K^i j_K^j|0\rangle}{\omega} E^j \quad \langle 0|j^i|0\rangle_{K'} = \frac{i\langle 0|j_{K'}^i j_{K'}^j|0\rangle}{\omega} E^j$$

sendo E^i o campo elétrico externo. A contribuição dos dois vales para a corrente média é dada da seguinte forma,

$$\langle 0|j^i|0\rangle_K + \langle 0|j^i|0\rangle_{K'} = \left\{ \frac{i\langle 0|j_K^i j_K^j|0\rangle}{\omega} + \frac{i\langle 0|j_{K'}^i j_{K'}^j|0\rangle_T}{\omega} \right\} E^j$$

Quando a TRS não é quebrada espontaneamente, a soma das contribuições dos dois vales para a condutividade é dada por

$$\sigma_V^{ik} = \lim_{\omega \rightarrow 0, \vec{p} \rightarrow 0} \left\{ i \frac{\langle j^i j^k \rangle}{\omega} - \frac{i\langle j^i j^k \rangle^T}{\omega} \right\}$$

No limite em que $\vec{p} \rightarrow 0$, a função de correlação e sua versão de tempo reverso são determinados, respectivamente pelas expressões

$$\langle j^i j^k \rangle = j_1 ((ip_0)^2) \delta^{ik} + j_2 \epsilon^{ik} (ip_0)$$

$$\langle j^i j^k \rangle^T = j_1 ((-ip_0)^2) \delta^{ik} + j_2 \epsilon^{ik} (-ip_0)$$

A coordenada p_0 que aparece nas equações acima, deve ser interpretado como a frequência ω na fórmula de Kubo.

Utilizando os resultados para a função de correlação e a sua versão de tempo reverso, determina-se que a condutividade possuirá a seguinte estrutura

$$\sigma^{ik} = \sigma^{xx} \delta^{ik} + \sigma^{xy} \epsilon^{ik}$$

Portanto, encontra-se que para uma fase TR não quebrada, apenas a parte longitudinal contribuirá. Os dois vales contribuirão igualmente e, dessa maneira, $N_V = 2$ ou $N_f = 4$. Finalmente, encontra-se que

$$\sigma^{xx} = \left(\frac{\pi e^2}{2h} \right) \left[1 + \left(\frac{92 - 9\pi^2}{18\pi} \right) \alpha_g + \mathcal{O}(e^4) \right]$$

$$\sigma^{xy} = 0$$

O limite considerado para a condutividade ótica foi $\omega \gg \frac{k_B T}{\hbar}$ e determinaram a correção para interação eletromagnética completa, para o valor não interagente de $\sigma_0 = \frac{\pi e^2}{2h}$.

$$\sigma_{xx}^{th} = 1.76 \frac{e^2}{h} \quad \sigma_{xx}^{ex} = 2.16 \frac{e^2}{h}$$

EFEITO HALL QUÂNTICO DE VALLEY

O valor médio da corrente de vale é definido como

$$\langle J_V^i \rangle = \langle 0 | j_K^i | 0 \rangle - \langle 0 | j_{K'}^i | 0 \rangle$$

Para $K = K'$, a corrente será nula. A partir da expressão acima, fica claro que

$$\langle J_V^i \rangle = \left\{ \frac{i \langle 0 | j_K^i j_K^j | 0 \rangle}{\omega} - \frac{i \langle 0 | j_K^i j_K^j | 0 \rangle^T}{\omega} \right\} E^j$$

Portanto, definimos um limite de frequência zero da condutividade ótica de vale, sendo calculada como

$$\sigma_V^{ik} = \lim_{\omega \rightarrow 0, \vec{p} \rightarrow 0} \left\{ i \frac{\langle j^i j^k \rangle}{\omega} - \frac{i \langle j^i j^k \rangle^T}{\omega} \right\}$$

A condutividade de vale, portanto, é determinada por

$$\sigma_V^{xy} = 4 \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{e^2}{h}$$

com n sendo um número inteiro. A componente longitudinal, por outro lado, será nula. Ou seja,

$$\sigma_V^{xx} = 0$$

A existência de uma condutividade de vale transversa caracteriza a ocorrência do Efeito Hall Quântico de Vale. É causado pela presença do termo que viola paridade e inversão temporal que surgiu da auto energia ou, equivalentemente, da função de correlação.

A condutividade Hall foi determinada exatamente e coincide com aquela obtida no Efeito Hall Quântico usual, apesar da ausência de qualquer campo magnético aplicado.

A pesquisa foi publicada no Physical Review X este ano e tem como autores o pesquisador Eduardo Marino e o doutorando Leandro Oliveira do Nascimento, ambos do Instituto de Física da UFRJ (Universidade Federal do Rio de Janeiro), juntamente com Cristiane de Moraes Smith, pesquisadora da Universidade de Utrecht, na Holanda, e Van Sérgio Alves, pesquisador da UFPa.

Os pesquisadores identificaram o efeito teoricamente ao incluir, pela primeira vez em um modelo do grafeno, a interação eletrodinâmica completa entre os elétrons dos orbitais p do carbono.

Também foram determinadas as correções à condutividade dc longitudinal do grafeno devidas a tais interações, estando os resultados em excelente acordo com os experimentos.

A 3D molecular model of a crystal lattice, likely diamond or silicon, is shown. The atoms are represented by dark, textured spheres connected by thin rods. The structure is a repeating pattern of tetrahedra. The word "OBRIGADO!" is overlaid in the center in a glowing, blue, monospace-style font. The background is dark, and the lighting highlights the structure of the lattice.

OBRIGADO!