Programa de Pós-graduação do Instituto de Física da USP

PGF5295 - Teoria Quântica de Muitos Corpos em Matéria Condensada

---

Efeito Hall Quântico no Grafeno

Aluno:
Walace de Sousa Elias
Professor:
Prof. Dr. Luís Gregório Dias

1 Introdução

Nos últimos anos algumas propriedades de partículas se movendo no plano tem sido estudadas de maneira intensa. Parte deste interesse surgiu após a descoberta do efeito Hall quântico e da supercondutividade à altas temperaturas . Em ambos os casos, o princípio físico fundamental destes sistemas está no fato de serem efeitos puramente planares.

A realização experimental do grafeno abriu uma possibilidade fascinante de observações em física da matéria condensada, um número de efeitos interessantes previamente considerados apenas ocorrer exclusivamente em física de partículas relativísticas. Grafeno é também a primeira realização concreta do mar de Dirac, o conceito que levou Dirac para prever a existência de antimatéria.

O efeito de Schwinger do par de criançāo de partículas fora do vácuo por um campo elétrico é experado ocorrer neste material e dessa forma, exibindo uma bela conexão entre física de matéria condensada e física de partículas.

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, dentre eles podemos destacar alguns exemplos, tais como:

- 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.

No entanto, apesar do movimento dos elétrons estar confinado ao plano, o campo eletromagnético através do qual eles interagem não está sujeito a este vínculo. Este fato, nos permite investigar inúmeras situações, incluindo a exigência de que o potencial eletrostático entre dois elétrons seja do tipo coulombiano ($\propto 1/r$) e não logarítimico, como acontece na EDQ$_3$. De fato, este resultado pode ser obtido se considerarmos o potencial clássico

$$V(\vec{r}) = e^2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{1}{|k|}, \tag{1}$$

onde $|k| = \sqrt{k^2} = \sqrt{\vec{k}^2 + k_3^2}$. Após realizarmos a integração no ângulo, encontramos

$$V(r) = \frac{e^2}{2\pi} \int_0^\infty J_0(|\vec{k}||\vec{r}|)\, d|\vec{k}| = \frac{e^2}{2\pi} \frac{1}{|\vec{r}|}. \tag{2}$$

Marino obteve a partir de primeiros princípios, uma descrição de tal sistema eletrônico que se move no plano, porém a interação era descrita como de partículas em um espaço-tempo quadrimensional. A quantização de tal teoria (pseudo eletrodinâmica quântica) foi estudada nas referências e os resultados mostraram que apesar da não localidade no de termo de Maxwell, a causalidade é respeitada e as funções de Green bem definidas.

Formalmente, pode-se obter tal teoria, no espaço euclidiano, modificando o termo de Maxwell $\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^2$ para $\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^2/(-\Box)^{1/2}$, reproduz a interação de duas partículas carregadas movendo-se sobre um plano (veja a equação (2)). A lagrangiana que descreve esta teoria no espaço euclidiano, será dada por

$$\mathcal{L} = \frac{1}{4}\frac{F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}}{(-\Box)^{1/2}} + \bar{\psi}\,(i\partial\!\!\!/ + m + e\,\gamma^{\mu}\,A_{\mu})\;\psi - \frac{\xi}{2}A_{\mu}\frac{\partial^{\mu}\partial^{\nu}}{(-\Box)^{1/2}}A_{\nu}, \tag{3}$$

onde $\Box \equiv \partial^2$, m é a massa "livre"do férmion que quebra explicitamente a simetria quiral e a escala de simetria e e a constante de acoplamento não renormalizada. O último termo é o termo de fixação de gauge. Como estamos interessados na quebra da simetria quiral, adotaremos uma representação 4×4 para as matrizes de Dirac, e consequentemente os férmions possuem 4 componentes. Como a constante de acoplamento e na equação (3) é adimensional, classificamos o modelo como sendo renormalizável, na contagem de potência usual, enquanto que na EDQ$_3$ é dita uma teoria super-renormalizável e finita no ultravioleta em três dimensões, e assim a constante de acoplamente será um parâmetro de escala natural da teoria.

As regras de Feynman deste modelo são obtidas de maneira usual. O vértice de interação é dado por $e\gamma^{\mu}$ e o propagador "livre"do férmion é dado por,

$$S_{0F}(p) = \frac{1}{-\gamma^{\mu}p_{\mu} + m}, \tag{4}$$

enquanto que o propagador do campo de gauge pode ser obtido utilizando o formalismo da integração funcional, calculando a parte quadrática da ação clássica do campo A_{μ}.

Portanto,

$$G_{0\,\mu\nu} = \frac{1}{(p^2)^{1/2}}\left[\delta_{\mu\nu} - \left(1 - \frac{1}{\xi}\right)\frac{1}{p^2}p_{\mu}p_{\nu}\right]. \tag{5}$$

sendo esta a expressão do propagador do campo de gauge.

2 Função de Correlação Corrente-Corrente

Determinamos no limite de $\omega \to 0$, 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, a condutividade σ^{ik} pode ser determinada através da relação

$$\sigma^{ik} = \lim_{\substack{\omega\to 0\\ \vec{p}\to 0}} \frac{i\langle j^i j^k\rangle}{\omega}, \tag{6}$$

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

Uma maneira mais formal de se obter as funções de correlação é através do funcional gerador Z[J], dado por

$$\mathcal{Z} = \mathcal{N} \int DA_\mu D[\bar{\Psi}\Psi] \exp[- \int d^3x \, (\mathcal{L} + ej^\mu J_\mu], \tag{7}$$

sendo $\mathcal{N}$ a constante de normalização, tal que

$$\mathcal{Z}[J = 0] = 1,$$

e J é a fonte de A_μ.

O gerador das funções de correlação conectadas é determinado por

$$W[J] = - \ln Z[J]. \tag{8}$$

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

$$\Gamma[A_c^\mu] = \int dx^3 \, J_\mu(x) A(x)_c^\mu - W[J], \tag{9}$$

com

$$A_c^\mu = \frac{\delta W[J]}{\delta J_\mu(x)}. \tag{10}$$

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

$$\langle j_\mu j_\nu \rangle = \frac{1}{e^2} \left. \frac{\delta^2 \Gamma[A_c]}{\delta A_\mu \delta A_\nu} \right|_{A_\mu = 0} \tag{11}$$

Porém, a equação (11) nada mais é que a auto-energia do campo de gauge A_μ, também conhecido como tensor de polarização

$$G_{\mu\nu}^{-1} - G_{0,\mu\nu}^{-1} = -e^2 \Pi_{\mu\nu}, \tag{12}$$

com $G_{0,\mu\nu}$ sendo dado pela equação (5). Portanto, imediatamente relacionamos a função de correlação corrente-corrente com a auto-energia de A_μ, isto é,

$$\langle j_\mu j_\nu \rangle_{1PI} = \Pi_{\mu\nu}. \tag{13}$$

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

$$\Pi^{(1)}_{\mu\nu} = -\frac{\sqrt{p^2}}{16} P_{\mu\nu} + \frac{1}{2\pi}(n+1/2)\epsilon_{\mu\nu\alpha}p^{\alpha}, \tag{14}$$

sendo $P_{\mu\nu} = \left[\delta_{\mu\nu} - \left(1 - \frac{1}{\xi}\right)\frac{1}{p^2}p_\mu p_\nu\right]$. A contribuição em ordem de dois loops é exclusiva da PQED e para um férmion simples e sem massa, obtêm-se o seguinte resultado

$$\Pi^{(2)}_{\mu\nu} = -\frac{\sqrt{p^2}}{16} C_\alpha \alpha_g P_{\mu\nu}, \tag{15}$$

com $C_\alpha = 0.056$ e $\alpha_g = 2.189$.

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

$$\langle j_\mu j_\nu \rangle_{1PI} = j_1(p)P_{\mu\nu} + j_2 \epsilon^{\mu\nu\alpha}p_\alpha. \tag{16}$$

Uma vez determinada as funções de correlação, podemos iniciar o estudo da condutividade para o grafeno.

3 Condutividade ($T = 0$ e $\omega \to 0$)

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

$$\sigma^{ik} = \lim_{\substack{\omega\to 0 \\ \vec{p}\to 0}} \frac{i\langle j^i j^k\rangle_{ret}}{\omega} = \sigma^{xx}\delta^{ik} + \sigma^{xy}\epsilon^{ik} \tag{17}$$

Quando calculamos a função de correlação corrente-corrente neste regime, devemos repassar $\gamma_i \to v_F\gamma_i$, nos vértices.

Dessa forma, as contribuições da auto energia do campo de gauge serão escritas como

$$\Pi^{00}(p_0, \vec{p}) = -\frac{1}{16}\frac{\vec{p}^2}{\sqrt{v_F^2\vec{p}^2 + p_0^2}}, \tag{18}$$

$$\Pi^{0i}(p_0, \vec{p}) = -\frac{1}{16}\frac{p^0 p^i}{\sqrt{v_F^2\vec{p}^2 + p_0^2}} + \frac{1}{2\pi}\left(n + \frac{1}{2}\right)\epsilon^{i0j}p_j, \tag{19}$$

$$\Pi^{ij}(p_0, \vec{p}) = -\frac{1}{16}\frac{\delta^{ij}(v_F^2\vec{p}^2 + p_0^2) - v_F^2 p^i p^j}{\sqrt{v_F^2\vec{p}^2 + p_0^2}} + \frac{1}{2\pi}\left(n + \frac{1}{2}\right)\epsilon^{ij0}p_0, \tag{20}$$

e a função de correlação corrente-corrente será expressa em termos de Π^{00}, Π^{ij}, Π^{0i}. No limite de $\vec{p} \to 0$ 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 dos vales 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 estão ligados uns aos outros por *time reverso symmetry* (TRS) e, consequentemente, a sua contribuição dependerá do fato desta simetria ser espontaneamente quebrada ou não. Quando a simetria de TR é preservada, ambos os vales contribuem da mesma forma, ou seja, $N_V = 2$ ou $N_f = 4$.

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

$$\langle 0|j^i|0\rangle_K = i\frac{\langle 0|j^i_K j^j_K|0\rangle}{\omega}E^i, \tag{21}$$

e

$$\langle 0|j^i|0\rangle_{K'} = i\frac{\langle 0|j^i_{K'} j^j_{K'}|0\rangle}{\omega}E^i, \tag{22}$$

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

$$\langle 0|j^i|0\rangle_K + \langle 0|j^i|0\rangle_{K'} = \left\{ i\frac{\langle 0|j^i_K j^j_K|0\rangle}{\omega} + i\frac{\langle 0|j^i_{K'} j^j_{K'}|0\rangle}{\omega} \right\}. \tag{23}$$

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

$$\sigma^{ik}_V = \lim_{\substack{\omega\to 0\\ \vec{p}\to 0}} \left\{ i\frac{\langle j^i j^k\rangle}{\omega} - i\frac{\langle j^i j^k\rangle^T}{\omega} \right\} \tag{24}$$

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

$$\langle j^i j^k\rangle = j_1((ip_0)^2)\delta^{ik} + j_2\epsilon^{ik}(ip_0) \tag{25}$$

e

$$\langle j^i j^k\rangle^T = j_1((-ip_0)^2)\delta^{ik} + j_2\epsilon^{ik}(-ip_0) \tag{26}$$

onde 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

$$\sigma^{ik} = \sigma^{xx}\delta^{ik} + \sigma^{xy}\epsilon^{ik}. \tag{27}$$

Portanto, encontra-se que para uma fase tempo reverso 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

$$\sigma^{xx} = \left(\frac{\pi e^2}{2h}\right)\left[1 + \left(\frac{92 - 9\pi^2}{18\pi}\right)\alpha_g + \mathcal{O}(e^4)\right], \tag{28}$$

e

$$\sigma^{xy} = 0. \tag{29}$$

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

$$\sigma^{th}_{xx} = 1.76\frac{e^2}{h} \tag{30}$$

e

$$\sigma^{ex}_{xx} = 2.16\frac{e^2}{h}. \tag{31}$$

4 Efeito Hall Quântico de Valley

A corrente de "*valley*" média é definida como

$$\langle J^i_V\rangle = \langle 0|j^i_K|0\rangle - \langle 0|j^i_{K'}|0\rangle, \tag{32}$$

sendo nula sempre que os dois vales contribuírem a mesma quantidade. De (32), está claro que

$$\langle J^i_V\rangle = \left\{\frac{i\langle 0|j^i_K j^j_K|0\rangle}{\omega} - \frac{i\langle 0|j^i_K j^j_K|0\rangle_T}{\omega}\right\} \tag{33}$$

Podemos, portanto, definir o limite de frequência nula da "condutividade óptica de *valley*" que é dada por

$$\sigma^{ik}_V = \lim_{\substack{\omega\to 0\\ \vec{p}\to 0}}\left\{\frac{i\langle j^i j^k\rangle}{\omega} - \frac{i\langle j^i j^k\rangle^T}{\omega}\right\}, \tag{34}$$

onde a soma sobre os spins é assumida ter sido realizada. Imediatamente, concluímos que a parte longitudinal se cancela, enquanto a componente transversa sobrevive. A condutividade de *valley* será dada

$$\sigma^{xy}_V = 4\left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{e^2}{h}, \tag{35}$$

para n sendo um número inteiro. A componente longitudinal, pelo contrário, é nula, isto é

$$\sigma^{xx}_V = 0. \tag{36}$$

O resultado acima é exato, como consequência do teorema de Coleman-Hill. A existência de uma condutividade transversa de *valley* caracteriza a ocorrência do efeito Hall Quântico de *Valley*. Isto ocorre pela presença dos termos de paridade anômola e violação tempo-reverso que surgem do tensor de polarização ou, equivalentemente, na função corrente de correlação.

O efeito Hall de "*Valley*" foi previsto anteriormente para ocorrer em sistemas de grafeno sujeitos a um potencial que quebre a simetria de inversão escalonada na sub-rede, ou de grafeno tenso, onde de acordo com recentes experimentos com campos pseudos-magnéticos, desenvolvem cargas opostas orientado nos vales pode ser tão grande quanto 300T.

5 Conclusão

A descoberta de materiais bidimensionais, tais como o grafeno, suscitou o interesse em estudar teorias bidimensionais, como QED3 e PQED. No campo da física da matéria condensada, um dos principais objetivos é encontrar novos estados da matéria, impulsionada pela quebra espontânea de simetria ou de ordem topológica.

Neste caso, as interações parecem ser uma fonte muito importante de novos fenômenos de interesse, por exemplo, o efeito Hall quântico fracionário e o quantum spin Hall, etc. PQED é um dos poucos exemplos da teoria quântica de campos, com aplicações à física da matéria condensada, que é capaz de capturar a interação tanto dinâmica e é suficientemente versátil para ser generalizada para uma grande variedade de diferentes materiais.

Neste trabalho, foi mostrado que a PQED é uma teoria unitária apesar da sua não localidade. Este é um passo importante a fim de verificar a consistência da teoria nível quântico e, portanto, sua aplicação legítima em sistemas reais. Dentro da abordagem da PQED para o grafeno, foi determinado o QVHE no acoplamento forte e a baixas temperaturas. Este é, essencialmente, a geração de correntes de Hall para cada vale na folha de grafeno.

No entanto, as correntes de vale propagam-se em direções opostas devido a simetria de reversão temporal. A maneira mais fácil de observar experimentalmente tal efeito é implementando um *filltering valley* e em seguida, executar medidas de transporte habitual para a condutividade Hall.

Referências

- **Interaction Induced Quantum Valley Hall Effect in Graphene**, E.C. Marino, Leandro O. Nascimento, Van Sérgio Alves, and C. Morais Smith, *Phys. Rev.* X 5, 011040 (2015);