

Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física “Gleb Wataghin”

Tese de Doutorado

**Destino dos Estados Estendidos e
Origem dos Estados Localizados no
Regime Hall Quântico**

Ana Luiza Cardoso Pereira

Orientador: Peter A. B. Schulz

Co-orientador: John T. Chalker

Março 2005

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

P414d

Pereira, Ana Luiza Cardoso

Destino dos estados estendidos e origem dos estados localizados no regime de efeito Hall quântico / Ana Luiza Cardoso Pereira. -- Campinas, SP : [s.n.], 2005.

Orientadores: Peter A . B. Schulz e John T. Chalker.

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Física do estado sólido. 2. Sistemas de baixa dimensionalidade. 3. Hall, Efeito quântico de. 4. Modelos ordenados-desordenados. 5. Anderson, Modelo de. 6. Interação elétron-elétron. 7. Blindagem (Eletricidade). 8. Níveis de Landau. I. Schulz, Peter Alexander Bleinroth. II. Chalker, John T. III. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". IV. Título.

(vsv/ifgw)

- **Título em inglês:** Fate of extended states and origin of localized states in quantum Hall regime
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
 1. Solid state physics
 2. Low-dimensional electron systems
 3. Quantum Hall effect
 4. Order-disorder models
 5. Anderson model
 6. Electron-electron interactions
 7. Shielding (Electricity)
 8. Landau levels
- **Área de concentração:** Física da matéria condensada
- **Titulação:** Doutora em física
- **Banca examinadora:**

Prof. Nelson Studart
Prof. Guennadii Gusev
Prof. Eduardo Miranda
Prof. Amir Ordacgi Caldeira.
Prof. Peter Alexander Bleinroth Schulz
- **Data da defesa:** 31.03.2005

Dedico este trabalho aos meus pais, Pedro e Élvia, e ao Cris.

Agradecimentos

Ao prof. Peter, meu agradecimento especial, pelo excelente convívio ao longo desses seis anos em que me orientou, incluindo mestrado e doutorado. Pelo incentivo, entusiasmo e presença em todo o processo compartilhado: dos testes nas simulações numéricas à escrita de artigos, de relatórios a conferências, dos obstáculos às conquistas, de tantas conversas e discussões... a esta tese.

Ao prof. John Chalker, por ter me recebido durante um ano na Universidade de Oxford, por toda a sua dedicação ao me orientar e tempo dispensado ao nosso trabalho.

À Capes, pelo apoio financeiro e por ter me possibilitado fazer o doutorado-sanduíche.

Ao prof. Luca Moriconi, pelo entusiasmo em todas as discussões durante o trabalho que desenvolvemos em colaboração. Agradeço também ao prof. Eduardo Mucciolo, pelo apoio de sempre, em particular pelo incentivo em relação ao doutorado-sanduíche. Ao prof. Ludwig Schweitzer e ao Dr. Thomas Koschny, pela conversa e troca de idéias sobre os resultados, os nossos e os deles, referentes à levitação dos estados estendidos. Ao prof. Philip Russel, pela mesa de trabalho na Universidade de Bath, e a todo o grupo de lá, pela acolhida no final do meu período na Inglaterra.

Aos professores e colegas do GPO – Fernando Iikawa, Maria José, Cerdeira, José Brum, Eliermes, Michel, Rodrigo, Hugo, Márcio, Nakaema, Evaldo, Luis, Alexandre, Paulo, Odilon, Gazoto... - por todos esses anos de reuniões de grupo às sextas-feiras, pelas discussões e pelo ambiente amigável. Agradeço também à Lene, sempre tão atenciosa.

A toda a comunidade do IFGW, em especial aos professores que me deram aulas, aos colegas da pós, aos funcionários da biblioteca, do centro de computação e da secretaria de pós-graduação, por contribuírem para tornar minha experiência, ao longo desses anos na Unicamp, tão rica e agradável. Foi importante a oportunidade de participar de atividades no instituto, como ser editora da Revista Physicae, dar aulas de Laboratório de Física I e participar das três primeiras edições do “Encontro de Jovens Pesquisadores”.

Aos amigos que tenho a alegria de ter ao meu lado, mesmo quando geograficamente distantes - minhas *irmãs* físicas: Roma, Cínthia, Laura, Carol, Scheila, Daniela, Pila, Marta, Lisandra, Cibelle e Françoise; mais amigos queridos da física: Liliana, Fred, Fernando, Caetano, Patricinha, Marina, Jereson, Alexandre “Cabelo”, Marcus, Ana Melva, Michel, Fabinho, Ana Cláudia, Vitor, Júlio; e também as amigas de longa data: Mariana(s), Luciene, Cibele, Roberta, Juliana, Tatyana... agradeço a todos pelo carinho e pelos muitos momentos compartilhados.

Aos amigos da Inglaterra, em especial à Andrea Jimenez Dalmaroni e ao Stephen Bingham, por todo o apoio e amizade. Agradeço também a companhia e gentileza dos meus colegas de sala em Oxford, Stephen West e Ville Mustonen, e dos colegas de moradia no St Hugh’s College - especialmente dos meus vizinhos, Rudis e Mateja. Aos brasileiros (e portugueses!), da *Oxford University Brazilian Society*, Celso, Carlos, Teo, Ivan, Wladimir, Ana, Zé e outros, pelos divertidos almoços no *Queen Elizabeth House* às sextas.

Aos meu tio Flávio pelo carinho e apoio que sempre me deu em Campinas, e também, é claro, à minha tia Rosângela.

Aos meus pais, Pedro e Élvia, e irmãos, Rafael e Camila, por serem como são - tão presentes e importantes na minha vida. Pelo suporte fundamental que sempre me ofereceram em todos os momentos, pelo amor e proximidade.

Ao Cristiano, pela cumplicidade, amor, incentivo e compreensão. Pelos planos sonhados e realizados juntos.

Resumo

Esse trabalho é dedicado ao estudo de dois problemas de interesse atual em sistemas quânticos de baixa dimensionalidade. Ambos são relacionados ao processo de localização eletrônica no regime Hall quântico. O primeiro problema diz respeito ao destino dos estados estendidos no limite de baixos campos magnéticos ou forte desordem, onde ocorre a transição de líquido de Hall para o isolante de Hall. O problema é abordado através de simulações numéricas, com um modelo de rede bidimensional tratado por um Hamiltoniano tight-binding, considerando-se tanto desordem tipo ruído branco quanto desordem correlacionada com perfil Gaussiano. Nós observamos que à medida que o campo magnético tende a zero ou a desordem é suficientemente aumentada no sistema, os estados estendidos sofrem um deslocamento em relação ao centro das bandas de Landau, indo em direção às mais altas energias e, eventualmente, ultrapassando a energia de Fermi. Esse mecanismo é chamado na literatura de *levitação* de estados estendidos. Nossos resultados permitem uma análise quantitativa. Identificamos os seguintes parâmetros como sendo os relevantes para mapear a levitação: (i) a razão entre escalas de energia – entre a energia de separação dos níveis de Landau e o alargamento do nível devido à desordem; e (ii) a razão entre escalas de comprimento – entre o comprimento magnético e o comprimento de correlação da desordem. Analisando uma vasta gama de parâmetros, uma expressão de escala descrevendo a levitação de estados estendidos é estabelecida neste trabalho.

O segundo problema abordado nesta tese é relacionado ao processo de blindagem do potencial de desordem e ao mecanismo de formação dos estados localizados em sistemas Hall quânticos. O trabalho analítico apresentado aqui é motivado por recentes resultados experimentais, que mostram imagens de microscopia com medidas locais do potencial eletrostático e da compressibilidade desses sistemas, evidenciando como se dá o processo de carga de estados localizados por cargas inteiras ou fracionárias (quase-partículas). Em um regime onde o comportamento é dominado por interações Coulombianas, estabelecemos um modelo eletrostático que descreve o estado localizado como sendo uma região compressível (quantum dot ou antidot) envolta por um plano incompressível, usando a aproximação de Thomas-Fermi para tratar as interações. O potencial eletrostático nas vizinhanças da região compressível é calculado, fornecendo o tamanho dos saltos que ocorrem no potencial à medida que cada carga é adicionada ou removida do estado localizado. Além de mostrar como estes saltos se tornam menores com o aumento do índice de Landau, nossos resultados mostram a dependência deles com a altura de observação do potencial (ou seja, a altura da ponta de prova em relação ao gás de elétrons). O modelo apresentado pode ser usado para tratar estados localizados observados nos platôs do efeito Hall quântico inteiro ou fracionário.

Abstract

This work is devoted to the study of two problems of current interest in low dimensional quantum systems. Both are related to the process of electron localization in the quantum Hall regime. The first problem refers to the fate of extended states in the limit of low magnetic fields or strong disorder, where the transition from quantum Hall liquid to Hall insulator takes place. A numerical approach to the problem is used, with a 2D lattice model treated in a tight-binding framework, considering both white-noise and Gaussian correlated disorder. We observe that as the magnetic field vanishes or the disorder is sufficiently increased in the system, the extended states are shifted from the Landau band centers, going to higher energies and, eventually, rising above the Fermi energy. This mechanism is referred in the literature as *levitation* of extended states. Our results allow a quantitative analysis. We identify the following parameters as the relevant ones to map the levitation: (i) the energy scales ratio - between the energy separation of consecutive Landau levels and the level broadening due to disorder; and (ii) the length scales ratio - between the magnetic length and the disorder correlation length. Analyzing a wide range of parameters, a scaling expression describing the levitation of extended states is established.

The second problem considered in this thesis is related to the screening of the disorder potential and to the mechanism of formation of localized states in quantum Hall systems. The analytical work we present here is motivated by recent imaging experiments, which probe locally the electrostatic potential and the compressibility of these systems, showing the charging of individual localized states by integer or fractional charges (quasiparticles). For a regime where the behavior is dominated by Coulomb interactions, we set out an electrostatic model describing the localized state as a compressible region (quantum dot or antidot) embedded in an incompressible background, using the Thomas-Fermi approximation to treat the interactions. The electrostatic potential in the vicinity of the compressible region is calculated, providing the size of potential steps as each charge is added or removed from the localized state. Besides from showing how the potential steps get smaller for higher Landau levels, our results show the dependence of these steps with the height of observation (i.e., the distance from the scanning probe to the electron gas). The proposed model can be used to treat localized states observed on integer or fractional quantum Hall plateaus.

Conteúdo

Introdução	1
1 Efeito Hall Quântico	3
1.1 Estados Estendidos e Estados Localizados	11
<u>Parte I: Destino dos Estados Estendidos</u>	15
2 Levitação: Conjectura e Observações	17
2.1 A Conjectura Inicial	17
2.2 Diagrama de Fases Global do EHQ	21
2.3 Resultados Experimentais sobre a Levitação	23
3 Abordagem Numérica	27
3.1 Hamiltoniano do Sistema 2D Desordenado	27
3.2 <i>Hopping</i> Complexo: Incluindo o Campo Magnético	30
3.3 Espectros de Energia	32
3.3.1 Limite Contínuo: Níveis de Landau	34
3.3.2 Condições de Contorno Periódicas	37
3.4 Densidade de Estados: Bandas de Landau	38
3.5 Cálculo do Grau de Localização	40
3.5.1 Razão de Participação	40
3.5.2 Número de Thouless	46
4 Análise Quantitativa da Levitação	47
4.1 Identificação da Levitação	47
4.2 Escalas de Energia	52
4.3 Escalas de Comprimento	55

4.4 Levitação no Primeiro Nível de Landau	57
4.5 Levitação nos Demais Níveis de Landau	59
Conclusões da Parte I	63
<u>Parte II: Origem dos Estados Localizados</u>	65
5 Imagens de Sistemas Hall Quânticos	67
5.1 Microscopia com Transistor de Único Elétron: Técnica e Resultados	68
5.2 Blindagem e Formação de Quantum Dots	74
5.3 Primeiras Estimativas: Tamanho dos Dots e Antidots	77
6 Abordagem Analítica	79
6.1 Teorias de Blindagem no Regime Hall Quântico	79
6.2 Blindagem Não-Linear e Solução da Eletrostática de um Quantum Dot	81
6.2.1 Três Passos para a Solução Exata	82
6.2.2 Quantização da Carga	91
7 Potencial Eletrostático	95
7.1 Potencial Eletrostático 3D ($\Phi(r, z)$)	95
7.2 Variações Discretas no Potencial	101
Conclusões da Parte II	105
Referências	111
Apêndice A – Restrições sobre μ	119
Apêndice B – Publicações Geradas por este Trabalho (artigos anexados)	121

Introdução

Desde a sua descoberta, em 1980 [1], até os dias de hoje, o efeito Hall quântico tem sido cenário de discussão de muita física nova e interessante. O conhecimento disponível em 1980 sobre mecânica quântica e sobre a física de sistemas eletrônicos confinados em duas dimensões (gases de elétrons bidimensionais) já era bem consolidado, entretanto a quantização da resistência Hall não havia sido prevista e sua observação experimental foi uma surpresa. A relevância da descoberta valeu a Klaus von Klitzing o prêmio Nobel de física do ano de 1985. Em 1982, mais surpresas com a observação de novos platôs inesperados: a descoberta do efeito Hall quântico fracionário [2], que valeu mais um prêmio Nobel para a área em 1998. A proposta de R. Laughlin para explicar os platôs do efeito fracionário envolve as *quase-partículas* [3], de carga menor que a carga de um elétron, e hoje, excitações de carga fracionária estão sendo observadas experimentalmente nestes sistemas Hall quânticos. Muito se avançou nos últimos 25 anos sobre o entendimento do efeito Hall quântico, mas o assunto ainda tem gerado novas questões de interesse fundamental e intenso debate dentro da física da matéria condensada.

Nesta tese são abordados dois dos assuntos ainda em aberto e de interesse atual sobre o Efeito Hall Quântico. O primeiro deles diz respeito ao destino dos estados estendidos no limite de baixos campos magnéticos ou forte desordem. Conseguimos, através de simulações numéricas, observar que à medida que o campo magnético é reduzido ou a desordem é aumentada significativamente no sistema, os estados estendidos sofrem um deslocamento em relação ao centro das bandas de Landau, indo em direção às mais altas energias. Esse mecanismo é chamado na literatura de *levitação* de estados estendidos e nossos resultados permitem uma análise quantitativa, identificando a dependência da levitação com os parâmetros físicos relevantes envolvidos.

O segundo assunto, abordado na segunda parte desta tese de doutorado, é relacionado ao processo de blindagem eletrônica e à natureza microscópica dos estados localizados nesses sistemas Hall quânticos. Esta parte do trabalho é fruto do projeto desenvolvido durante um ano

de “doutorado sanduíche” na Universidade de Oxford, Inglaterra, sob supervisão do professor John Chalker. O trabalho analítico desenvolvido é motivado por recentes resultados experimentais, que mostram imagens de microscopia no regime de efeito Hall quântico, evidenciando como se dá o processo de carga dos estados localizados. Tratamos o estado localizado como sendo um quantum dot ou antidot e usamos um tratamento eletrostático para modelar os recentes resultados experimentais.

Toda a literatura relativa a esses dois problemas abordados é bastante rica, envolvendo na montagem dos quebra-cabeças de ambos os casos, a discussão de uma física bastante interessante, com peças importantes vindas tanto de contribuições experimentais quanto teóricas. Esperamos que os resultados obtidos no decorrer deste trabalho possam contribuir para o encaixe das peças desses quebra-cabeças.

Capítulo 1

Efeito Hall Quântico

Antes de discutir a fenomenologia do Efeito Hall Quântico, vale relembrar rapidamente a física envolvida no Efeito Hall Clássico.

O Efeito Hall Clássico, descoberto por Edwin H. Hall em 1879, é um fenômeno muito bem conhecido e largamente utilizado para caracterização de materiais. A geometria básica de uma medida de Efeito Hall está esquematizada na Figura 1.1. Aplica-se um campo magnético B perpendicularmente à superfície de um material condutor plano. Faz-se passar uma corrente elétrica I ao longo de uma das direções da amostra e são então medidas duas voltagens características. A primeira, V , é medida ao longo da direção de passagem da corrente e fornece a resistência R do material ($R = V/I$). A outra voltagem, V_H , é medida na direção perpendicular à passagem da corrente, como mostra a Figura 1.1. O efeito que Hall observou em 1879 foi que quando um campo magnético é aplicado perpendicularmente à amostra, surge uma voltagem V_H (voltagem Hall) nesta segunda direção, sendo V_H diretamente proporcional à intensidade do campo magnético. A explicação para este efeito é bem conhecida: na presença do campo magnético, os elétrons que se movem na direção da corrente, sofrem a ação da força de Lorentz, acumulando-se em um dos lados da amostra, gerando assim a voltagem V_H .

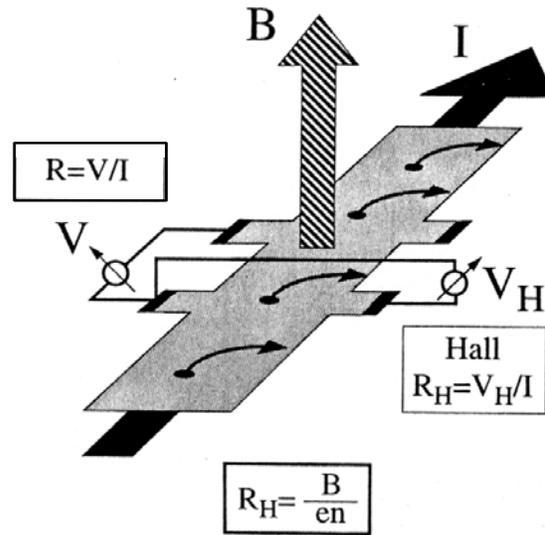


Figura 1.1: Representação esquemática de um experimento Hall. O campo magnético B é perpendicular ao plano do material e à corrente I . Os pontos pretos representam os elétrons, que sentem a força de Lorentz devida ao campo magnético e sofrem desvio lateral, acumulando-se em um dos lados do material. Com isso é gerada a tensão Hall V_H na direção perpendicular à passagem da corrente e ao campo magnético.

Naturalmente, quanto maior B , maior a força de Lorentz, e maior V_H . A razão V_H / I é conhecida como *Resistência Hall* (R_H), e esta é também diretamente proporcional a B . Além disso, observa-se que V_H é maior quanto menor a densidade eletrônica (n) no material. Isso porque, para que menos elétrons gerem a mesma corrente, precisam ser mais “rápidos”. Uma vez mais rápidos, os elétrons passam a sentir uma força de Lorentz maior, criando uma maior tensão V_H e portanto uma resistência R_H maior. Assim, a expressão clássica para R_H é:

$$R_H = \frac{B}{en} \quad (1.1)$$

Desta maneira, uma medida da resistência Hall determina tanto o sinal quanto a concentração dos portadores de carga do condutor, sendo portanto uma medida muito freqüente em Física da Matéria Condensada.

Fazendo medidas de resistência Hall em dispositivos em que os elétrons estão confinados em duas dimensões (sistemas bidimensionais), sob condições experimentais especiais de temperaturas muito baixas ($T < 4\text{K}$) e campos magnéticos intensos ($B \sim 10\text{T}$), von Klitzing [1] observou o inesperado aparecimento de platôs na resistência Hall R_H , como mostra a Figura 1.2. E ainda mais surpreendente é a observação de que os valores de R_H nas posições dos platôs são precisamente quantizados, obedecendo à seguinte relação:

$$R_H = \frac{h}{ie^2} \quad (1.2)$$

onde i é um número inteiro e h é a constante de Planck. A precisão com que hoje se consegue determinar estes valores quantizados de resistência é de algumas partes por bilhão e, devido a tamanho grau de precisão, em 1990 o Efeito Hall Quântico passou a ser utilizado como padrão da definição metrológica de resistência.

Outro fato notável do EHQ é que os platôs ocorrem sempre nos mesmos valores independentemente dos detalhes do material, como sua geometria exata, concentração de impurezas ou temperatura. É constante mesmo quando as medidas são feitas em diferentes tipos de materiais semicondutores.

Além dos platôs na resistência Hall, observou-se que a resistência longitudinal R vai a zero nas regiões de campo magnético correspondentes aos platôs, como também mostra a Figura 1.2.

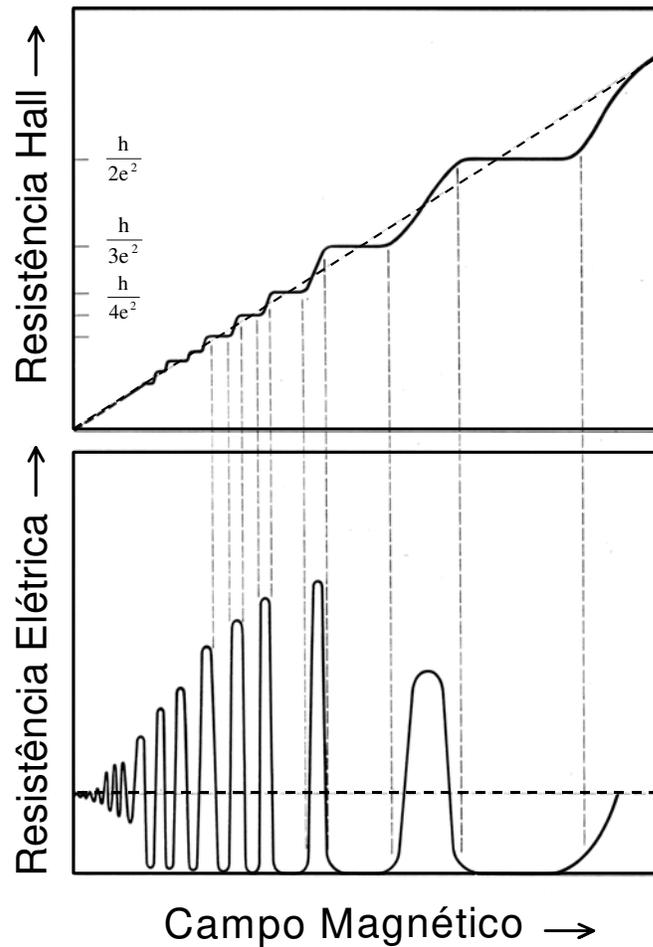


Figura 1.2: O Efeito Hall Quântico manifesta-se como platôs na resistência Hall R_H , que coincidem com as regiões em que a resistência elétrica R , vai a zero. Em contraste, no experimento clássico (linha tracejada) R_H aumenta linearmente com o campo magnético e R é constante.

Enquanto a Figura 1.2 mostra esquematicamente os platôs em R_H e zeros em R , a Figura 1.3 a seguir mostra resultados experimentais com medidas do Efeito Hall Quântico, onde os platôs estão muito bem definidos e as transições entre um platô e outro são abruptas. Medidas dessa precisão são feitas a muito baixas temperaturas, sendo que esta em particular foi realizada a $T = 8\text{mK}$.

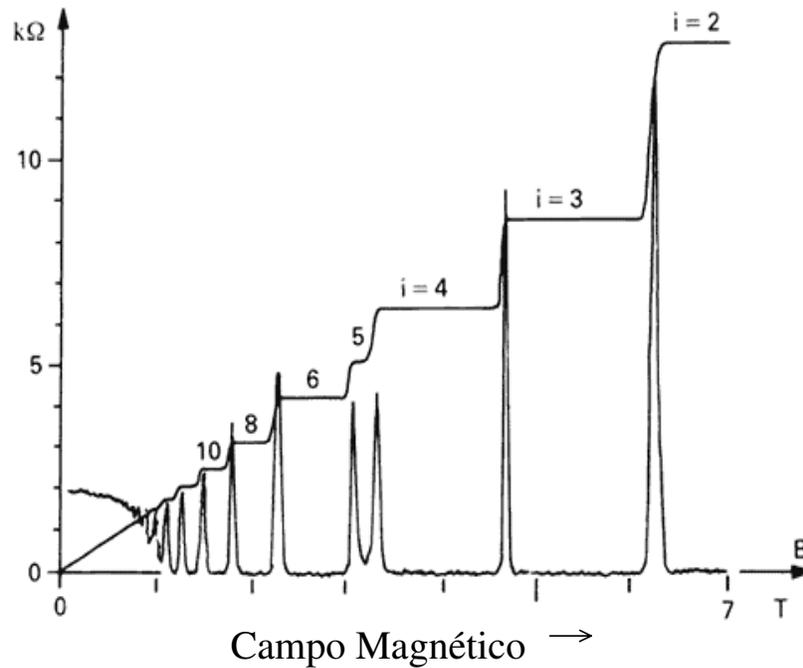


Figura 1.3: Medida experimental evidenciando as características do Efeito Hall Quântico: os platôs na resistência Hall, coincidindo com os zeros na resistência elétrica.

Em 1982, Daniel Tsui, Horst Stormer e Arthur Gossard [2] observaram platôs adicionais ocorrendo na Eq. (1.2) quando i assume valores fracionários. A partir de então foram observados platôs ocorrendo para diversos valores fracionários específicos, por exemplo, $i = 1/3, 2/3, 2/5, 3/5$, etc... Este ficou conhecido como Efeito Hall Quântico Fracionário (EHQF), enquanto o primeiro passou a ser chamado de Efeito Hall Quântico Inteiro (EHQI). A Figura 1.4 mostra a complexidade e diversidade de platôs fracionários que são atualmente observados experimentalmente.

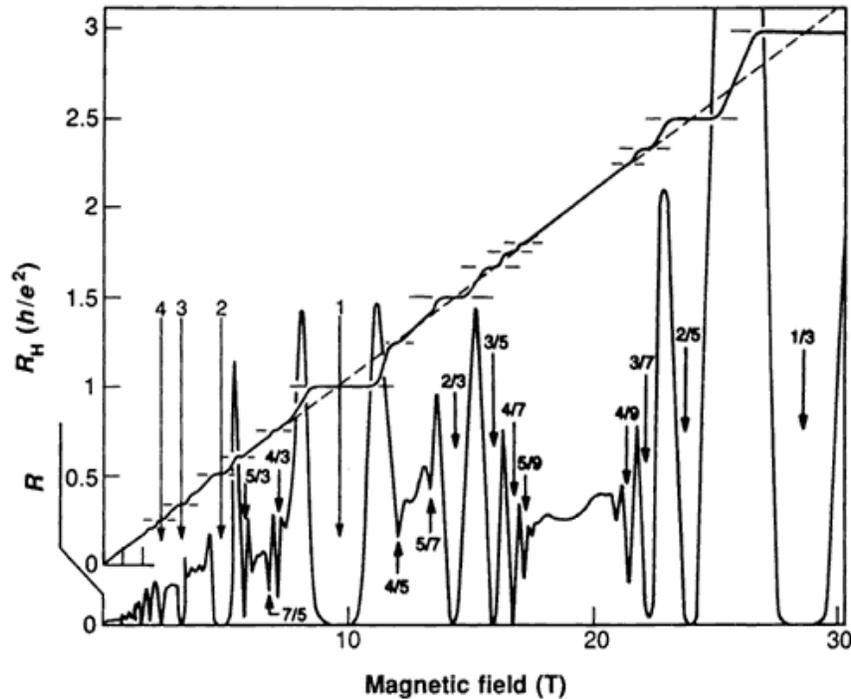


Figura 1.4: Medida experimental evidenciando diversos dos platôs e das oscilações do efeito Hall quântico fracionário.

Para explicar o efeito Hall quântico, a origem dos platôs em R_H e dos mínimos em R , deve-se primeiramente frisar que trata-se de um efeito característico de sistemas eletrônicos bidimensionais (não se manifesta em 3D).

Gases de elétron bidimensionais são formados, por exemplo, na interface entre dois diferentes tipos de semicondutores. O balanço auto-consistente entre o diagrama de potencial na interface e a redistribuição de carga originária da dopagem da barreira dão origem à formação de um poço quântico na interface, com níveis discretos de energia na direção z . Sub-bandas de energia se formam como resultante da soma dos níveis discretos na direção z e da relação de dispersão parabólica do elétron livre no plano xy . A baixas temperaturas ($T < 4$ K) e baixas densidades de portadores, apenas a primeira sub-banda estará ocupada. Se a posição do nível de Fermi E_F na primeira sub-banda estiver bem abaixo da energia da segunda sub-banda (ou seja, se E_F for pequeno quando comparado à separação ΔE entre as sub-bandas) e $k_B T \ll \Delta E$, o movimento dos elétrons estará portanto confinado estritamente a um plano bidimensional. É neste tipo de sistema que o Efeito Hall Quântico é observado.

O próximo fator importante no caminho para a explicação do EHQ é entender o efeito do campo magnético nesses sistemas bidimensionais. Classicamente, o efeito de um campo magnético intenso sobre elétrons em movimento é forçá-los a órbitas circulares de raio ciclotrônico $R_c = mv/qB$ e frequência ciclotrônica $\omega_c = eB/m$. Entretanto, a mecânica quântica prevê a quantização das energias do sistema, que se manifesta como uma quantização das órbitas permitidas aos elétrons. Quanticamente, os níveis de energia do sistema no plano perpendicular ao campo magnético (no caso, plano xy), passam a ser definidos por:

$$E_N = \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad (1.5)$$

onde $N = 0, 1, 2, 3, \dots$. Estes são os chamados níveis de Landau e esta quantização será extremamente importante para a explicação do EHQ (para uma dedução da Eq. (1.5), ver referência [4]).

Em três dimensões entretanto, apesar desta discretização em níveis de Landau no plano xy , não há *gaps* de energia para os elétrons, uma vez que há um contínuo de energias na direção z . Portanto, apenas em 2D a densidade de estados do sistema apresentará *gaps* de energia devido ao campo magnético.

Em 2D e na ausência de B , a densidade de estados eletrônicos por unidade de área e por unidade de energia, $g(E)$, é dada por [5]:

$$g(E) = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2}, \quad (1.6)$$

onde o fator $1/2$ indica sistema resolvido em spin.

Como esta densidade de estados é uma constante (independente de E), quando na presença de B , cada nível de Landau deverá conter o mesmo número de estados por unidade de área (uma vez que os níveis são igualmente espaçados em energia). Chamando este número de d (a *degenerescência* dos níveis), temos:

$$d = \frac{eB}{h} \quad (1.7)$$

Deve-se observar que a degenerescência d depende apenas do campo magnético (além das constantes fundamentais) e independe de qualquer parâmetro do material. É, portanto, uma medida que independe do material considerado. A partir da Eq. (1.7) vê-se que, variar o campo magnético implica em variar d , o número de estados que “cabem” em cada nível de Landau. A temperaturas suficientemente baixas, os elétrons tendem a ocupar os níveis de mais baixas energias. Consideremos a densidade de estados por unidade de área (n) num sistema bidimensional como sendo fixa. É claro que se B for suficientemente intenso, todos os elétrons poderão estar apenas no primeiro nível de Landau, ocupando-o parcialmente. Conforme o campo B vai sendo reduzido, d diminui linearmente, e aquele número fixo de elétrons passa a ocupar cada vez mais níveis de Landau.

Chegamos aqui num dos pontos cruciais para a interpretação do Efeito Hall Quântico. Toda vez que B for tal que haja um número i de níveis de Landau totalmente preenchidos (enquanto os níveis acima deste i -ésimo estão completamente vazios), teremos a seguinte relação para a densidade de estados: $n=id$. Assim, substituindo este n na expressão (1.1) para a resistência Hall clássica ($R_H = B/en$), e usando a definição de d dada pela Eq. (1.7), temos

$$R_H = \frac{h}{ie^2}$$

que é exatamente a expressão para a resistência Hall observada nas posições dos platôs. Ou seja, quando B é tal que se tenha i níveis de Landau completamente preenchidos, a resistência Hall clássica tem exatamente o valor em que se apresentam as quantizações da resistência Hall no efeito quântico: $R_H = h/ie^2$.

Verifica-se portanto que o EHQ está intimamente relacionado à natureza discreta do espectro de energias do sistema bidimensional na presença de campo magnético. Cada platô está associado ao preenchimento completo de um dos sucessivos níveis de Landau.

Entretanto, isso ainda não explica a existência dos platôs. O preenchimento exato dos níveis de Landau ocorre apenas para valores específicos de campo magnético, e o que se observa é que a resistência Hall $R_H = h/ie^2$ mantém-se quantizada para intervalos consideráveis de valores de campo magnético. Para esclarecer esse ponto, na próxima seção serão apresentados os conceitos de estados estendidos e localizados, e discutido o papel fundamental desempenhado pela desordem na interpretação do EHQ.

1.1 Estados Localizados e Estados Estendidos

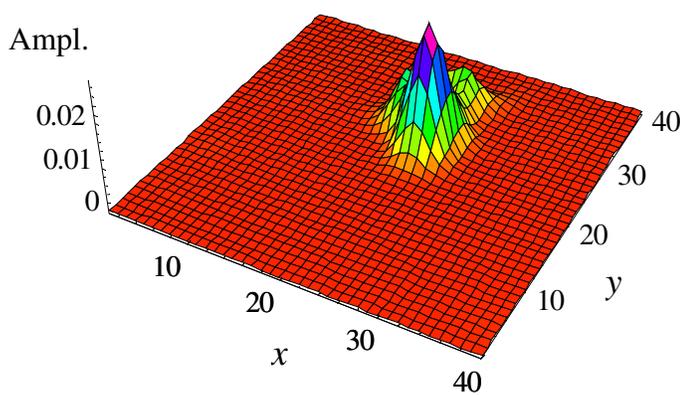
Para explicar a origem dos platôs, é necessário levar em consideração os efeitos de desordem sobre o espectro de níveis de Landau. Todo sistema real apresenta algum grau de desordem, devido a deformações na rede ou a impurezas presentes na constituição do material. Por mais modernas e cuidadosas que sejam as técnicas de preparação do gás de elétrons bidimensional, sempre restam pequenas imperfeições que vão dar origem à formação de vales e picos na energia potencial ao longo da interface onde estão os elétrons.

Logo após a descoberta do EHQ, diversos trabalhos teóricos vieram discutir o efeito de localização de estados eletrônicos nas bandas de Landau [6].

O conceito de localização das funções de onda eletrônicas foi introduzido por P. W. Anderson [7]. Considerando um sistema com potencial aleatório, devido à desordem, tem-se que a função de onda deixa de ser uma onda plana e passa a ser multiplamente espalhada pelos desníveis do potencial. Dois tipos de comportamentos são então esperados para a função de onda. Se após ser multiplamente espalhada, ela mantiver amplitudes significativas por todo o sistema, será chamada de estendida. Anderson mostrou que, por outro lado, pode acontecer de a função de onda passar a ser localizada, restrita a regiões finitas do espaço, de modo que sua

amplitude decai exponencialmente a partir de determinado centro. Elétrons nestes chamados estados localizados não contribuem para o transporte a temperatura zero. Partículas em estados estendidos podem, mesmo a temperatura zero, escapar para o infinito e contribuir para o transporte. Uma discussão mais detalhada sobre o problema de localização de Anderson pode ser encontrada, por exemplo, nas referências [8]. A Figura 1.5 mostra a amplitude de probabilidade de uma função de onda localizada e de uma função de onda estendida, calculadas para um sistema desordenado (utilizando o modelo numérico que será discutido adiante, no capítulo 2).

- Função de Onda Localizada -



- Função de Onda Estendida -

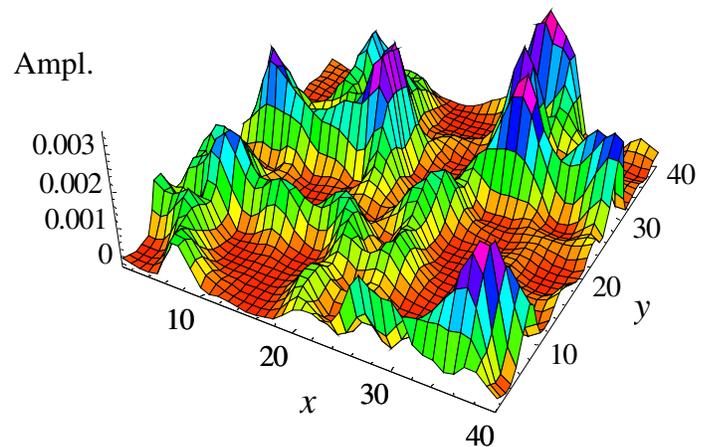


Figura 1.5: Amplitudes de probabilidade da função de onda eletrônica, para um sistema desordenado. Elétrons em estados localizados não contribuem para o transporte a $T=0$, enquanto estados estendidos têm participação na condutividade mesmo a $T=0$.

Na presença de campo magnético, se o sistema fosse perfeitamente ordenado, as energias dos estados eletrônicos seriam degeneradas exatamente nas energias dos níveis de Landau (Eq. (1.5)), conforme mostra a Figura 1.6b. Porém, a presença de desordem provoca o alargamento

dos níveis de Landau, que passam a formar bandas, como mostra o esquema da Figura 1.6c. Estados localizados têm sua energia ligeiramente deslocada da energia exata E_N do nível de Landau, com isso haverá a presença de estados estendidos no centro das bandas e de estados localizados nos extremos, numa disposição de acordo com a indicada na Figura 1.6c.

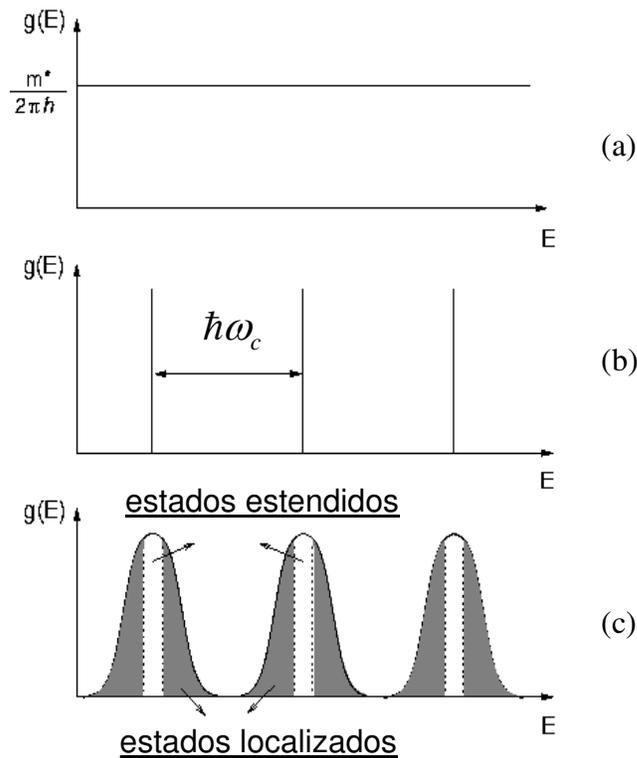


Figura 1.6: Densidade de Estados por unidade de área e por unidade de energia, $g(E)$, em um sistema bidimensional. **(a)** Para $B = 0$, a densidade de estados por spin tem valor constante $m^* / 2\pi\hbar$. **(b)** Para $B \neq 0$, e em um sistema perfeitamente ordenado, os estados são degenerados nos níveis de Landau. **(c)** Níveis de Landau alargados pela desordem, formando bandas de estados estendidos no centro e localizados nos extremos.

A formação dos platôs do efeito Hall quântico inteiro pode então ser explicada pela existência de *gaps* de energia entre os níveis de Landau e por esta disposição de estados

estendidos e localizados nas bandas de Landau. Como foi discutido, conforme se varia o campo magnético, o preenchimento dos níveis (agora bandas) de Landau vai sendo modificado: vão sendo populados ou despopulados, conforme o campo é reduzido ou aumentado, respectivamente. Como o preenchimento de estados localizados não contribui para a condutividade (e resistividade) elétrica, quando o nível de Fermi do sistema encontrar-se nas regiões de estados localizados (extremos das bandas), não haverá alterações nas propriedades de transporte. Isso explica que a resistência Hall mantenha-se constante (platôs) em toda a região de campo magnético correspondente ao preenchimento de estados localizados.

Portanto, paradoxalmente, é justamente o fato de haver desordem que possibilita a existência de um efeito tão preciso.

Falta ainda justificar a outra característica do Efeito Hall Quântico: os zeros na resistência longitudinal R_{xx} . Ressalta-se aqui que apesar da resistência longitudinal ir a zero, o sistema não se caracteriza como um supercondutor, pois tem-se simultaneamente (o tratamento tensorial em duas dimensões mostra isso [5]) a condutividade longitudinal $\sigma_{xx} = 0$ nas regiões dos platôs. Estes zeros em R_{xx} são portanto uma consequência do tratamento tensorial em 2D e podem ser explicados fisicamente pela ausência de possibilidade de espalhamento. Os zeros correspondem exatamente às regiões de campo magnético onde se observam os platôs - portanto, às regiões de estados localizados. Nessa região, todos os estados estendidos da última banda que foi preenchida estão ocupados e não há estados estendidos disponíveis para onde um elétron possa ser espalhado (a baixas temperaturas não há energia térmica suficiente para que o elétron seja espalhado para um estado estendido do próximo nível de Landau vazio).

Sabe-se que a origem dos estados localizados é relacionada ao potencial de desordem. Mas há outros fatores contribuindo, que vão além do quadro de partícula independente, como o processo de blindagem eletrônica do potencial desordenado, quando se considera a interação elétron-elétron. A natureza microscópica desses estados localizados no regime Hall quântico vem sendo discutida recentemente e será abordada na Parte II desse trabalho.

Quanto aos estados estendidos do centro das bandas de Landau, serão alvo da discussão da Parte I desse trabalho, onde será acompanhada a posição desses estados em relação às bandas de Landau em função dos diversos parâmetros relevantes ao sistema.

Parte I

Destino dos Estados Estendidos

Capítulo 2

Levitação:

Conjectura e Observações

2.1 A Conjectura Inicial

A explicação do efeito Hall quântico inteiro (a campos magnéticos finitos) pressupõe, como visto até aqui, a presença de estados estendidos no centro das bandas de Landau. Por outro lado, na ausência de campo magnético, a teoria de escala para a localização [9] prevê que para um sistema bidimensional na presença de qualquer grau de desordem, todos os estados serão localizados^{*}. Surgiu, portanto, a questão de como os estados estendidos evoluem para o limite de localização, à medida que o campo magnético B tende a zero. Analogamente, colocou-se a pergunta de qual o destino dos estados estendidos quando o potencial aleatório (ou seja, o grau

^{*} Esta teoria de escala foi estabelecida em 1979 e prevaleceu por volta de 20 anos. Entretanto, é importante ressaltar que nos últimos anos, diversos experimentos foram reportados com evidências de transições metal-isolante em algumas amostras 2D a $B = 0$. Para uma revisão sobre o assunto ver referência [10].

de desordem) fosse suficientemente forte de modo que todos os estados fossem localizados. O primeiro a chamar a atenção para esta questão foi B. I. Halperin em 1982 [11].

Em 1984, R. B. Laughlin [12] e D. E. Khmel'nitskii [13], propuseram (em trabalhos independentes) que à medida que a desordem no sistema aumentasse, ou o campo magnético fosse reduzido, os estados estendidos não desapareceriam simplesmente, mas sofreriam um deslocamento a partir do centro das bandas de Landau, em direção às mais altas energias. Desta forma, quando os estados estendidos da banda de Landau de índice mais baixo eventualmente ultrapassassem a energia de Fermi, restariam apenas estados localizados e a condutância Hall do sistema iria a zero.

Nesta proposta, que foi chamada de “levitação” de estados estendidos, a expressão para a energia dos estados estendidos (E_N^e) é a seguinte [12,13]:

$$E_N^e = \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \left[1 + \frac{1}{(\omega_c \tau)^2} \right] \quad (2.1)$$

onde $\omega_c = eB/m$, τ é o tempo de espalhamento elástico e $N = 0, 1, 2, \dots$. Ou seja, E_N^e corresponde à energia do N -ésimo nível de Landau, multiplicada pelo fator entre colchetes. Desta maneira, no limite de $\omega_c \tau \gg 1$ (ou seja, altos campos magnéticos e pequenas desordens) as energias dos estados estendidos reduzem-se às energias dos níveis de Landau. Para $\omega_c \tau \cong 1$ há o desvio dos estados estendidos para mais altas energias, sendo que no limite $\omega_c \tau \ll 1$ esse desvio “explode”, tendendo a infinito. Um esquema desta proposta de levitação de estados estendidos está na Figura 2.1. As linhas contínuas correspondem às energias dos estados estendidos E_N^e , enquanto as linhas tracejadas indicam as energias $E_N = (N + 1/2)\hbar\omega_c$ dos três primeiros níveis de Landau (que, no caso desordenado, correspondem às posições dos centros das bandas alargadas).

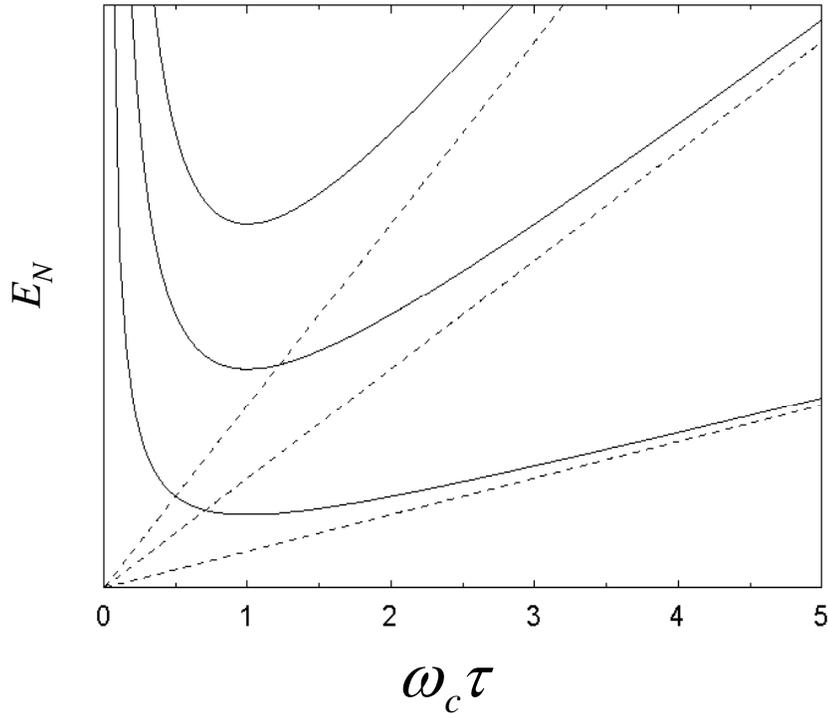


Figura 2.1: Esquema da levitação de estados estendidos, de acordo com as referências [12,13]. As linhas tracejadas correspondem às energias dos níveis de Landau $N=0$, $N=1$ e $N=2$.

Esta proposta veio portanto reconciliar a existência de estados estendidos, necessários para a explicação do Efeito Hall Quântico, com o quadro de localização em sistemas 2D na ausência de campo magnético ou para desordens muito intensas.

Para chegar à expressão (2.1), Laughlin e Khmel'nitskii basearam-se em argumentos de teoria de escala [14] que sugeriam que as energias dos estados estendidos poderiam ser obtidas solucionando-se a equação:

$$\sigma_{xy}(E_F = E_N^e) = \left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{e^2}{h} \quad (2.2)$$

onde σ_{xy} é a condutância Hall. É importante notar que a Eq. (2.2) se trata de uma conjectura e, como coloca M. M. Fogler [15], “sofre da ausência de uma derivação completamente satisfatória a partir de leis de escala” (para uma discussão sobre este assunto, ver também referências [16] e [17]). Tal conjectura tem origem no fato de que os valores quantizados da condutância Hall são dados por $\sigma_{xy} = N \frac{e^2}{h}$ (como foi visto, estes valores são tão bem estabelecidos que servem atualmente como padrão da definição metrológica da unidade de resistência). Exatamente quando passa pela energia do estado estendido, a condutância Hall pula de um platô para o outro. Portanto, foi suposto que a transição ocorreria exatamente no ponto de condutância Hall de valor intermediário entre dois platôs adjacentes, conforme a equação (2.2).

A sugestão de Laughlin [12] e Khmel'nitskii [13] foi então equacionar a expressão (2.2) com a expressão clássica para a condutância (válida para pequenos comprimentos de escala), dada pela fórmula de Drude-Lorentz [5]:

$$\sigma_{xy}^{class.} = \sigma_0 \frac{\omega_c \tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} \quad (2.3)$$

sendo σ_0 a condutância de Drude dada por $\sigma_0 = n(E)e^2 \tau / m^*$, onde $n(E)$ é a densidade eletrônica por unidade de área. Desta forma, equacionando (2.2) e (2.3), tem-se:

$$n(E_N^e) = \left(N + \frac{1}{2} \right) \frac{m^* \omega_c}{h} \left[1 + \frac{1}{(\omega_c \tau)^2} \right] \quad (2.4)$$

Finalmente, como a densidade eletrônica por unidade de área em um sistema bidimensional é dada por $n(E) = (m^* / 2\pi\hbar^2) E$, chega-se à Eq. (2.1) para as energias dos estados estendidos.

2.2 Diagrama de Fases Global do EHQ

Considerando que os estados estendidos dos sistemas Hall quânticos evoluem exatamente conforme a proposta de levitação (Eq. (2.1)), S. Kivelson, D. H. Lee e S. C. Zhang [17] propuseram um diagrama de fases para o efeito Hall quântico inteiro.

A representação das diferentes fases do sistema Hall quântico, mostrada na Figura 2.2a, é feita em função do campo magnético (eixo x) e do grau de desordem no sistema (eixo y). Além desta parte aqui apresentada, o diagrama proposto na referência [17] sugere também um mapeamento para o efeito Fracionário (que não será discutido aqui) e é conhecido como Diagrama de Fases Global para o Efeito Hall Quântico.

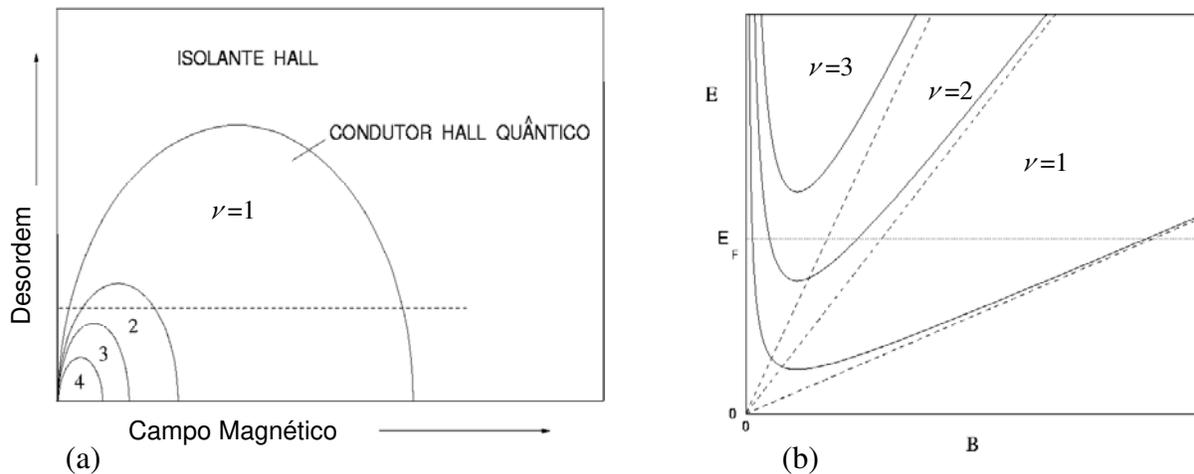


Figura 2.2: (a) *Diagrama de Fases Global para o Efeito Hall Quântico Inteiro.* (b) *Esquema da levitação de estados estendidos.*

No diagrama da Figura 2.2a, as linhas contínuas que separam uma fase da outra marcam a passagem do nível de Fermi do sistema por estados estendidos (sendo considerado o limite $T \rightarrow 0$, onde há apenas um estado estendido por banda de Landau e não uma região de largura finita em energia com estados estendidos).

As fases indicadas pelos índices ($\nu = 1, 2, 3, \dots$) são chamadas de fases tipo *Condutor Hall Quântico* (ou *Líquido de Hall*) e correspondem às regiões onde são observados os diferentes platôs Hall (e onde R_{xx} vai a zero). Os índices ν correspondem portanto exatamente aos índices i das resistências Hall quantizadas do EHQI, ou seja, $R_{xy} = h/ie^2$. Assim, pode-se também dizer que os índices do diagrama correspondem ao número de energias críticas (estados estendidos) existentes abaixo do nível de Fermi. Deve-se observar que nestas fases tipo condutor Hall quântico, apesar da resistência longitudinal R_{xx} ir a zero, o sistema não se caracteriza como um supercondutor, pois tem-se simultaneamente (o tratamento tensorial mostra isso [5]) a condutividade longitudinal $\sigma_{xx} = 0$ nestas regiões.

A fase chamada de *Isolante Hall* corresponde às regiões de campo magnético ou de desordem para as quais não há nenhum estado estendido abaixo do nível de Fermi.

É importante notar que o diagrama é construído considerando-se o nível de Fermi fixo. Para exemplificar e explicar a construção do diagrama, consideremos que o nível de Fermi corresponda à energia E_F marcada na Figura 2.2b pela linha pontilhada. O grau de desordem representado nesta figura (que como vimos, é fixo) equivale no diagrama 2.2a, aproximadamente à posição de desordem fixa indicada pela linha tracejada. Ou seja, conforme o campo magnético B é reduzido, a partir da região de altos campos, os estados estendidos da 1ª e da 2ª banda de Landau (nesta ordem) cruzam para baixo do nível de Fermi seguindo aproximadamente a linearidade da energia dos níveis de Landau com B . Com isso, o primeiro e o segundo platô são observados. Depois, na região de baixos campos, continuando a redução do campo B , os estados estendidos voltam a cruzar o nível de Fermi, desta vez ultrapassando-o em energia devido à levitação, e em ordem inversa: o primeiro a cruzar é o da 2ª banda e depois o da 1ª.

Se a desordem representada na Figura 2.2b fosse menor, as levitações seriam menos pronunciadas e, para o mesmo nível de Fermi, poderiam ser observados cruzamentos com estados estendidos de bandas superiores (como indica o diagrama: quanto menor a desordem, tem-se acesso a um número cada vez maior de platôs). O Diagrama de Fases Global para o EHQI traduz, portanto, este comportamento proposto para os estados estendidos pela conjectura de levitação.

2.3 Resultados Experimentais sobre a Levitação

O Diagrama de Fases Global para o EHQ [17], proposto em 1992, oito anos após a conjectura de Laughlin e Khmel'nitskii, teve papel fundamental na atração de interesse para o problema da levitação. Isto porque a esquematização do diagrama, conforme visto na seção anterior, tornou mais evidentes as conseqüências da proposta de levitação. Desde então, diversos trabalhos experimentais têm abordado essa questão [18-30], porém ainda com muitos conflitos de interpretação e não havendo até agora um claro consenso.

Em particular, foi inicialmente despertado o interesse na tentativa de observar experimentalmente as previstas transições *Isolante Hall-Conductor Hall Quântico-Isolante Hall*, em função da variação do campo magnético. E de fato, este tipo de transição “metal-isolante” em 2D começou a ser observada a partir de 1993 [18-20]. Para determinar e diferenciar as fases isolantes e condutoras, são feitas diversas medidas do Efeito Hall (resistência Hall e resistência longitudinal) variando-se ligeiramente a temperatura de realização da medida, como por exemplo mostra o resultado da Figura 2.3.

As linhas verticais pontilhadas na Figura 2.3 marcam os valores críticos de campo magnético (cruzamento das curvas) que separam regiões onde a resistência longitudinal ρ_{xx} tem diferentes dependências com a temperatura. Na região central (2), correspondente ao platô em ρ_{xy} , observa-se que a redução de temperatura implica em diminuição da resistência ρ_{xx} , condizente com o comportamento de condutores. Enquanto isso, nas regiões (1) e (3) o decréscimo de temperatura implica em aumento na resistência ρ_{xx} , comportamento característico de isolantes. É interessante observar que todas as curvas se cruzam exatamente nos mesmos valores de campo magnético. A observação mais relevante é a transição entre as regiões (2) e (1), quando a baixos campos magnéticos o sistema retorna para a fase isolante, o que seria explicada pela levitação de estados estendidos. Os primeiros experimentos a reportar este tipo de transição [18-20] observaram transições ocorrendo na região onde apenas o primeiro platô é observado

(sistema fortemente desordenado) e foram anunciados como estando de acordo com o Diagrama de Fases Global.

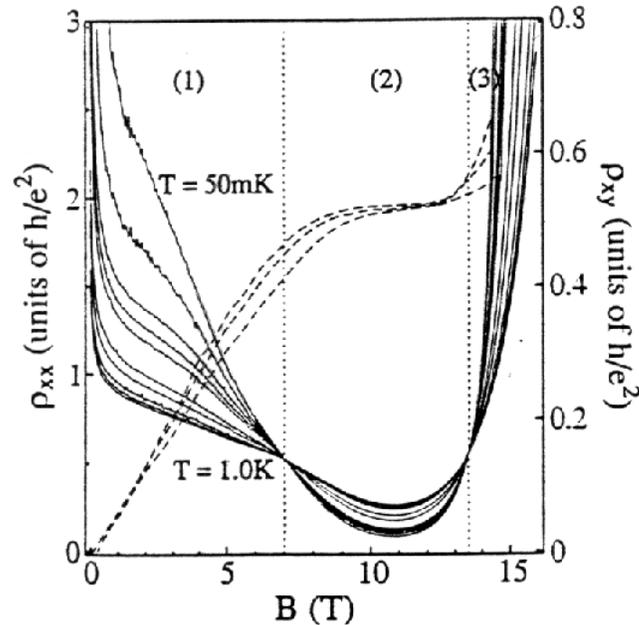


Figura 2.3: Medidas de ρ_{xx} (linhas contínuas) e de ρ_{xy} (linhas tracejadas) em função de B , a temperaturas variando de 50 mK a 1.0 K. Conforme o campo magnético é reduzido, observam-se transições da região Isolante Hall (3) para o Condutor Hall Quântico (2) e novamente para o Isolante Hall (1). Retirada da referência [20].

Entretanto, outros resultados obtidos posteriormente [21-23] com o mesmo tipo de experimento, apresentaram algumas contradições em relação ao Diagrama Global e portanto à conjectura de levitação. Nestes outros experimentos, foram observadas transições diretas de platôs $\nu > 1$ para o isolante. Tais transições diretas não são permitidas pelo diagrama baseado na conjectura inicial de levitação [17]. No caso, por exemplo, em que se consiga definir até o terceiro platô, a redução do campo magnético deveria, segundo a proposta de levitação, ocasionar primeiramente a transição $\nu = 3 \rightarrow \nu = 2$, depois $\nu = 2 \rightarrow \nu = 1$, e finalmente de $\nu = 1 \rightarrow$ isolante. Mas estas etapas não são observadas.

Indo além da observação das transições, alguns trabalhos experimentais passaram a acompanhar os valores de campo magnético crítico da transição para diferentes densidades de portadores n [24,25,27-30]. Ou seja, fizeram um mapeamento do plano n - B , determinando B crítico da mesma maneira descrita anteriormente (cruzamento das curvas ρ_{xx} indicando diferentes dependências com a temperatura). A Figura 2.4b mostra um desses mapeamentos do plano n - B , onde cada círculo indica a posição da transição entre as diferentes fases do regime Hall quântico. O diagrama de fases correspondente, em termos do inverso do fator de preenchimento (que é diretamente proporcional a B), é mostrado na parte (a) da Figura.

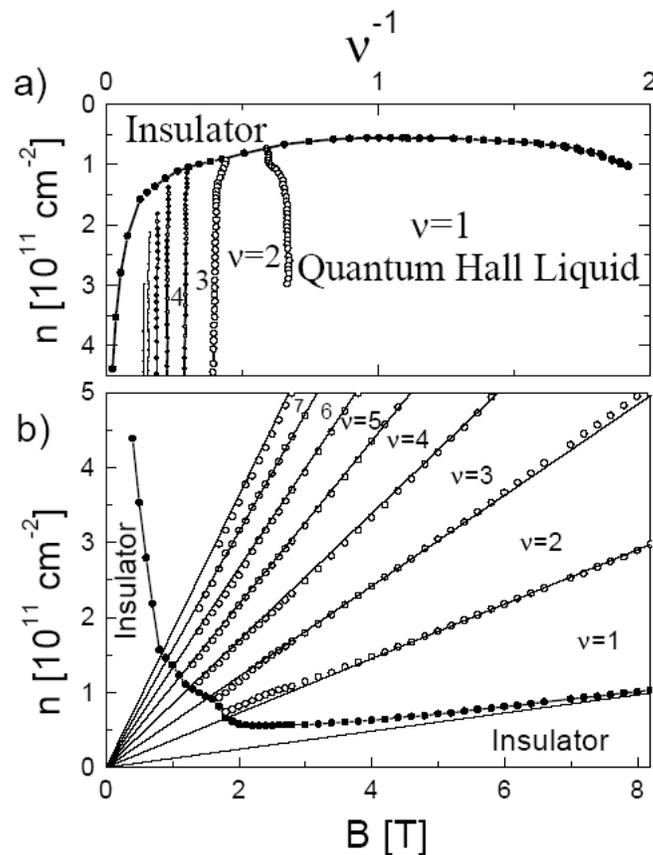


Figura 2.4: (a) Diagrama de fases observado experimentalmente para o EHQI, no plano densidade em função do inverso do fator de preenchimento. O diagrama é construído a partir do resultado mostrado em (b). Os círculos cheios indicam as transições Condutor Hall para Isolante, enquanto os círculos vazados indicam transições de uma fase Condutor Hall para outra (entre diferentes platôs). Figura da referência [29].

A observação de um limiar entre as fases de *Líquido de Hall* e *Isolante* revela a existência de transições diretas entre fases $\nu > 1$ e a fase isolante. A levitação observada para os estados estendidos da primeira banda é atribuída no artigo como sendo possivelmente uma levitação aparente, isto é, não seria uma levitação genuína dos estados estendidos em energia, mas sim um efeito aparente causado pela superposição das bandas de Landau [29]. Com os resultados que obtivemos nesse trabalho de tese, vimos que esta interpretação é equivocada [31] e que ambos os efeitos devem ser considerados: levitação em energia mais superposição.

Outros diagramas de fase experimentais similares, que permitem transições diretas $\nu > 1$ para o isolante, são sugeridos em outros trabalhos experimentais [20,21,22,27,28]. Vale ressaltar que a prevista levitação mais acentuada para os níveis mais altos (segundo a conjectura inicial) não foi observada em nenhum trabalho experimental até agora - pelo contrário: observa-se sempre levitação mais acentuada para a primeira banda.

O tratamento teórico para o problema é principalmente baseado em abordagens numéricas [32-45]. Embora existam também alguns poucos trabalhos analíticos abordando a questão da levitação [15,46-49], que tratam perturbativamente os efeitos de mistura entre níveis de Landau, o entendimento do mecanismo microscópico ainda é limitado.

Para investigar a questão da levitação dos estados estendidos discutida aqui neste capítulo, fazemos simulações numéricas de sistemas bidimensionais na presença de campo magnético e de desordem. O modelo numérico utilizado será apresentado a seguir, no Capítulo 3. As discussões contidas neste Capítulo 3 são de grande importância para justificar a adequação do modelo ao sistema físico que queremos estudar.

Os resultados obtidos serão apresentados no Capítulo 4. Observando a posição dos estados estendidos em relação à densidade de estados, ou seja, em relação às bandas de Landau, conseguimos inequivocamente identificar o efeito de levitação de estados estendidos conforme a desordem é aumentada ou o campo magnético é reduzido no sistema. Não apenas identificamos a levitação, como também quantificamos de diferentes maneiras a evolução desta levitação. O trabalho apresentado aqui representa a primeira análise numérica quantitativa para a levitação.

Capítulo 3

Abordagem Numérica

3.1 Hamiltoniano do Sistema 2D Desordenado

No caso de materiais perfeitamente ordenados, o estudo de suas propriedades eletrônicas é relativamente simples. Tem-se, nesse caso ideal, simetria de translação e os elétrons são elétrons de Bloch, que apresentam uma dinâmica regular e periódica. Entretanto, materiais reais apresentam sempre algum grau de desordem, devido à presença de impurezas, deformações na rede, vacâncias ou outros defeitos. Com isso, a simetria de translação é quebrada e temos que abandonar o teorema de Bloch, sendo em geral necessário abordar o problema com modelos numéricos que incorporem a desordem.

O modelo que consideramos nesse trabalho é o modelo comumente utilizado para sistemas desordenados, descrito pelo seguinte Hamiltoniano *tight-binding* :

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{(i,j)} V_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (3.1)$$
$$\langle i|j\rangle = \delta_{(i,j)}$$

onde i é o índice de sítio da rede, que em todo o trabalho que se segue será considerada como sendo uma rede quadrada de parâmetro a . Apenas um orbital s por sítio é considerado. No primeiro termo do Hamiltoniano, ϵ_i é a energia do orbital atômico localizado no sítio i . O segundo termo, V_{ij} , é o chamado parâmetro de *hopping*, que descreve o acoplamento efetivo entre os átomos que constituem a rede. Serão consideradas somas sobre sítios (i,j) primeiros vizinhos.

A desordem é introduzida tomando-se as energias dos sítios ϵ_i como aleatórias e assumindo-se alguma função de distribuição para elas. Desta forma tem-se a chamada desordem diagonal. Outra forma de introduzir desordem neste modelo seria considerar os parâmetros de *hopping* V_{ij} como aleatórios (desordem não-diagonal), mas não trataremos deste caso aqui.

A forma mais largamente utilizada para se introduzir a desordem no Hamiltoniano (3.1) é a empregada no Modelo de Anderson, onde as energias aleatórias ϵ_i consideradas são não-correlacionadas. Assume-se uma distribuição uniforme de energias em torno de um dado valor ϵ_0 , sendo esta distribuição com largura W . Assim, as energias em cada sítio da rede variam aleatoriamente entre $\epsilon_0 - W/2$ e $\epsilon_0 + W/2$. A probabilidade de que um determinado sítio tenha uma dada energia é independente das energias dos demais sítios da rede. Este modelo de Hamiltoniano *tight-binding* da Eq. (3.1), com esta distribuição de energias descrita, foi primeiramente sugerido por P. W. Anderson [7], precursor no estudo do problema de localização de estados eletrônicos (hoje conhecido como problema de localização de Anderson). No modelo proposto por Anderson, consideram-se os *hoppings* constantes entre primeiros vizinhos, $V_{ij} = V$. Assim o grau de desordem é determinado pela razão W/V . Para V fixo, a desordem é aumentada aumentando-se a largura da distribuição de energias W . O potencial desordenado descrito consiste de espalhadores tipo função delta (sorteados aleatoriamente) e corresponde à distribuição do potencial de *ruído branco* definida em um sistema contínuo. Por isso, o nome distribuição de ruído branco (*white-noise*) é também freqüentemente associado a este tipo de desordem na literatura.

Além dessa desordem tipo ruído branco, consideramos também nesse trabalho a desordem correlacionada. Este outro modelo de desordem considera a introdução de correlações entre as

energias dos diferentes sítios da rede. Neste modelo, as energias dos sítios atômicos ϵ_i que vão descrever a paisagem de energia potencial são obtidas da seguinte maneira. Primeiramente são gerados números aleatórios ϵ_j , não-correlacionados, numa distribuição uniforme de largura W em torno de ϵ_0 . Porém, em vez de usarmos esses ϵ_j diretamente para as energias dos sítios j , como fazemos no caso da desordem tipo ruído branco, tomamos:

$$\epsilon_i = \frac{1}{\pi\lambda^2} \sum_j \epsilon_j e^{-|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|^2/\lambda^2}$$

onde \mathbf{R}_i é a posição espacial do sítio i e λ é o comprimento de correlação da desordem. Desta forma, introduz-se um vínculo entre as energias dos diferentes sítios, sendo que este vínculo será mais forte quanto menor for $|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|$ (ou seja, quanto menor a distância entre os sítios), e quanto maior for λ .

Alguns exemplos da forma que assume esse potencial correlacionado, para diferentes comprimentos de correlação, podem ser observados na Figura 3.1. O primeiro dos 3 perfis corresponde ao caso de desordem tipo ruído branco (sorteio aleatório). Os λ 's indicados correspondem a múltiplos do parâmetro de rede a . Vemos de fato que, quanto maior o comprimento de correlação, mais suave torna-se o perfil do potencial desordenado na rede, para uma mesma amplitude W considerada.

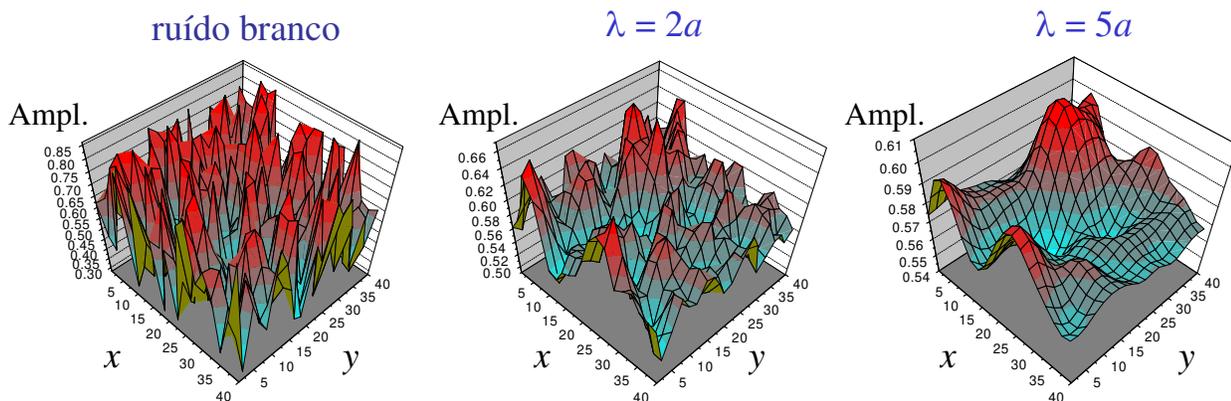


Figura 3.1: Perfil do potencial de desordem (amplitude em cada sítio numa rede de 40×40 sítios). Observa-se a suavização do potencial com o aumento do comprimento de correlação λ .

3.2 *Hopping* Complexo:

Incluindo o Campo Magnético

Considerar neste modelo um campo magnético uniforme e perpendicular ao sistema implica em alterações no termo de *hopping* do Hamiltoniano (3.1). Como foi mostrado por Peierls [51] e por Luttinger [52], o efeito do campo magnético sobre elétrons num potencial periódico é representado pela inclusão da seguinte fase complexa no parâmetro de *hopping*:

$$V_{ij}(B) = V_{ij}(0) \exp \left[\frac{ie}{\hbar} \int_i^j \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \right] , \quad (3.2)$$

onde \mathbf{A} é o potencial vetor magnético ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$). Essa alteração feita no parâmetro de *hopping* é uma consequência da *substituição de Peierls*, onde o momento cristalino $\hbar\mathbf{k}$ no Hamiltoniano para elétrons de Bloch é substituído por $\hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A}$ na presença de campo magnético (para uma dedução detalhada de como a substituição de Peierls leva à adição da fase descrita pela Eq. (3.2), ver por exemplo as referências [53]).

Para determinar os $V_{ij}(B)$ no modelo desejado, observe-se que os limites de integração i e j são coordenadas discretas, ou seja, são sítios de uma rede quadrada bidimensional com acoplamento apenas entre primeiros vizinhos. Pode-se definir cada sítio i da rede com coordenadas cartesianas $(x,y) = (na,ma)$, onde m e n são números inteiros e a é a constante de rede.

Para representar o campo magnético na direção z , há duas formas convenientes e comumente usadas para definir o potencial vetor \mathbf{A} . A primeira é o calibre de Landau (assimétrico), onde $\mathbf{A} = (0, -Bx, 0)$, e a segunda é o calibre simétrico, onde $\mathbf{A} = \left(\frac{1}{2}By, -\frac{1}{2}Bx, 0 \right)$.

Obviamente, há invariância de calibre: como a quantidade fisicamente observável é o campo magnético \mathbf{B} , todos os potenciais vetores \mathbf{A} que satisfaçam $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ serão fisicamente

equivalentes. Optamos por trabalhar com o calibre de Landau, que no caso discreto é dado por $\mathbf{A} = (0, -Bna, 0)$. Com essa escolha de calibre, e tomando $V_{ij}(0) = V$, podemos ver a partir da Eq. (3.2) que o *hopping* ao longo da direção \hat{x} da rede será simplesmente: $V_x(B) = V$. Enquanto isso, o hopping entre primeiros vizinhos ao longo da direção \hat{y} será dado por

$$V_y(B) = V e^{\pm i2\pi n\phi/\phi_0}, \quad (3.3)$$

sendo que os sinais + e - correspondem a translações nas direções $-\hat{y}$ e $+\hat{y}$, respectivamente. A quantidade ϕ/ϕ_0 é definida como

$$\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{e}{h} Ba^2$$

onde $\phi = Ba^2$ é o fluxo magnético por célula unitária e $\phi_0 = h/e$ é o quanta de fluxo magnético (as unidades são de tal forma que a quantidade ϕ/ϕ_0 é adimensional).

Assim, usando a notação $|n, m\rangle$ para identificar os sítios da rede quadrada, o Hamiltoniano (3.1) na presença de campo magnético pode ser reescrito como:

$$H = \sum_{n,m} \epsilon_{n,m} |n, m\rangle \langle n, m| + \sum_{n,m} \left[V e^{-i2\pi n\phi/\phi_0} |n, m\rangle \langle n, m+1| + V e^{i2\pi n\phi/\phi_0} |n, m\rangle \langle n, m-1| + V |n, m\rangle \langle n+1, m| + V |n, m\rangle \langle n-1, m| \right] \quad (3.4)$$

Para maiores detalhes, passo a passo, de como se chegar à expressão (3.4) e como utilizá-la para obter a matriz Hermitiana a ser diagonalizada, de elementos $\langle n, m|H|n', m'\rangle$, ver discussão feita no capítulo 2 da tese de mestrado [54]. Nesta discussão é apresentado, inclusive, um exemplo para uma rede de 3×3 sítios, com o cálculo de todos os elementos da matriz 9×9 a ser diagonalizada para obtenção dos níveis de energia (auto-valores) e funções de onda do elétron sobre a rede (auto-vetores).

3.3 Espectros de Energia

Nas seções anteriores foram discutidas as formas de se incluir os efeitos de desordem e de campo magnético num modelo de rede bidimensional tratado na aproximação *tight-binding*. O ponto de partida para o estudo dos efeitos de desordem sobre os níveis de Landau, bem como dos limites do modelo, é o estudo da estrutura eletrônica de um sistema ordenado. Esse estudo pode ser realizado analiticamente. Para esse fim, consideramos o Hamiltoniano H do modelo, definido pela Eq. (3.4). A equação de Schroedinger, $H\psi = E\psi$, para a função de onda bidimensional $\psi(n, m)$ pode ser escrita na seguinte forma:

$$Ve^{-i2\pi n\phi/\phi_0}\psi(n, m+1) + Ve^{i2\pi n\phi/\phi_0}\psi(n, m-1) + V\psi(n+1, m) + V\psi(n-1, m) + \epsilon_{n,m}\psi(n, m) = E\psi(n, m). \quad (3.5)$$

Os coeficientes devidos ao fluxo magnético na Eq. (3.5) dependem apenas de n (direção x). O movimento em y pode então ser separado, assumindo-se que a função de onda na direção y preserva o seu comportamento de onda plana, como em $\phi/\phi_0 = 0$ ou seja,

$$\psi(n, m) = e^{i\nu m}\varphi(n). \quad (3.6)$$

Assim, sem levar em conta os efeitos de desordem, ou seja, fazendo $\epsilon_{n,m} = \text{constante}$ (pode-se escolher arbitrariamente $\epsilon_{n,m} = 0$) e tomando $V = 1$, obtém-se a partir da Eq. (3.5) a conhecida equação de Harper [55]:

$$\varphi(n+1) + \varphi(n-1) + 2\cos(2\pi n\phi/\phi_0 - \nu)\varphi(n) = E\varphi(n). \quad (3.7)$$

Inspecionando a estrutura de bandas da equação de Harper em função de ϕ/ϕ_0 , Hofstadter mostrou pela primeira vez em 1976 [56], através de seu trabalho numérico, as ricas

características espectrais exibidas por este modelo. Reproduzindo os resultados de Hofstadter, utilizamos o modelo numérico descrito até aqui, sem considerar a desordem, e obtivemos o espectro de energia em função do fluxo magnético mostrado na Figura (3.2). Este resultado gráfico é hoje conhecido como borboleta de Hofstadter.

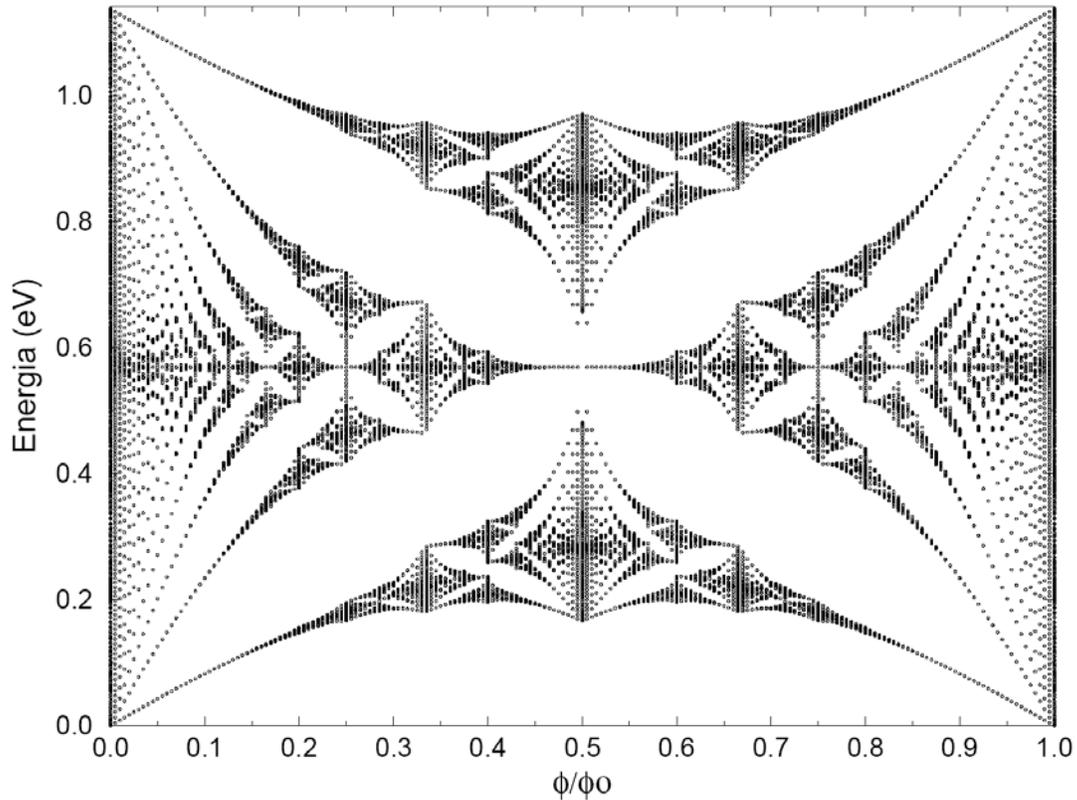


Figura 3.2: *Espectro completo de energia em função do fluxo magnético, que obtivemos com o modelo descrito aplicado a uma rede sem desordem.*

O espectro de energia é criticamente dependente da razão ϕ/ϕ_0 . Se a razão for um número racional, ou seja, se

$$\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{p}{q}, \quad (3.8)$$

onde p e q são inteiros, positivos e primos entre si, então a equação de Harper é numericamente tratável. Nesse caso, o espectro, que sem campo magnético consiste de uma única banda, passa a ser dividido em q bandas separadas por *gaps*. O espectro é simétrico em relação ao zero de energia (centro da banda). É também periódico com respeito ao fluxo magnético, com período 1.

3.3.1 Limite Contínuo: Níveis de Landau

Num gás de elétrons bidimensional formado numa heterojunção (GaAs/AlGaAs por exemplo), os estados eletrônicos são bem descritos dentro da aproximação da massa efetiva. A energia total de um elétron no fundo da banda de condução é dada por: $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*}$, onde m^* é massa efetiva do elétron. Trata-se portanto de uma relação de dispersão parabólica. Por outro lado, é uma propriedade bem conhecida que redes *tight-binding* com interações entre primeiros vizinhos fornecem bandas eletrônicas na forma de cosseno [57]. Para pequenos vetores de onda (isto é, para pequenos espaçamentos de rede, a , no presente modelo), o cosseno é uma aproximação muito boa para a relação de dispersão parabólica.

A conexão entre o modelo de rede *tight-binding* e o modelo contínuo, no qual as energias dos níveis de Landau são dadas por $E_n = (n+1/2)\hbar\omega_c$, é garantida pela seguinte escolha do parâmetro de hopping V e da energia intrínseca dos sítios ϵ_0 [54]:

$$V = \frac{\hbar^2}{2m^* a^2} \quad \text{e} \quad \epsilon_0 = -4V. \quad (3.9)$$

No espectro da Figura 3.2 e nos demais resultados que serão mostrados aqui nesta tese, os parâmetros V e ϵ_0 foram ajustados para uma massa efetiva $m^* = 0.067m_e$ (fundo da banda de condução do GaAs) e parâmetro de rede $a = 20 \text{ \AA}$.

É importante notar que a rede *tight-binding* de que estamos tratando não corresponde exatamente à rede cristalina do sistema real. A rede *tight-binding* em questão deve ser entendida como sendo uma discretização matemática que serve de aproximação ao comportamento contínuo das funções de onda. Os resultados obtidos com o modelo *tight-binding* serão mais precisos quanto menor o parâmetro de rede a considerado. Entretanto, para manter a geometria da estrutura constante, à medida que se reduz o espaçamento da rede, deve-se aumentar apropriadamente o número de sítios na rede. Como o número de sítios determina a dimensão da matriz a ser diagonalizada, temos que buscar uma otimização, considerando os limites da capacidade computacional.

Nesse contexto é necessário definir os limites de validade do modelo de rede para emular um sistema contínuo, do ponto de vista numérico. Primeiramente, vale lembrar a definição de comprimento magnético:

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}. \quad (3.10)$$

O comprimento magnético l_B , uma das escalas de comprimento fundamentais no Efeito Hall Quântico, pode ser pensado como a extensão espacial da função de onda, no estado fundamental, no potencial gerado pelo campo magnético. l_B diminui com o aumento do campo magnético, como seria de se esperar se pensarmos na analogia clássica, onde o aumento de B faz com que os elétrons se movam em órbitas ciclotrônicas de raio cada vez menor.

A Figura 3.3 reproduz parte do mesmo espectro de Hofstadter mostrado na Figura 3.2, no intervalo de pequenos fluxos magnéticos. Sobrepostos ao espectro (em vermelho) estão as energias dos níveis de Landau correspondentes. Pode-se observar nessa região do espectro, o modelo numérico reproduzindo os níveis de Landau, principalmente no caso dos primeiros níveis.

É interessante notar que com os parâmetros utilizados, o comprimento magnético será igual ao parâmetro de rede ($a = 20\text{\AA}$) para $\phi/\phi_0 = 0.16$. De fato, abaixo desse valor de fluxo, o

primeiro nível de Landau é bem emulado, porém, a partir $\phi/\phi_0 = 0.16$, o primeiro nível de Landau começa a se desdobrar (quebra da degenerescência) e a apresentar os efeitos de rede. Para os demais níveis esse efeito começa a ser notado para fluxos menores. Em todos os resultados que serão apresentados nessa tese, considerou-se $\phi/\phi_0 \leq 0.05$, onde podemos garantir que o limite contínuo está sendo cuidadosamente emulado.

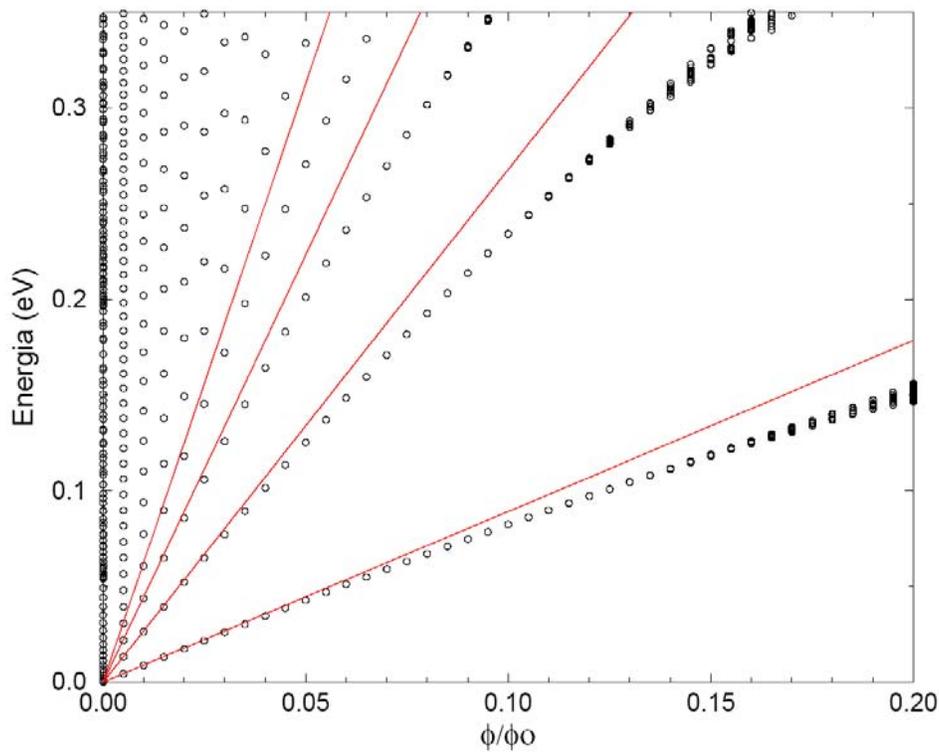


Figura 3.3: Comparação das energias dos níveis de Landau do modelo contínuo (linhas vermelhas) com as energias dos estados da região de baixos fluxos do espectro de Hofstadter.

3.3.2 Condições de Contorno Periódicas

Considerar condições de contorno periódicas evita o aparecimento dos estados de borda que estão presentes no sistema finito, delimitado por contorno rígido [58].

A imposição de condições de contorno periódicas a ambas as direções da rede (\hat{x} e \hat{y}) equivale a considerarmos um sistema de geometria toroidal, como ilustra a Figura (3.4). Ou seja, equivale a uma repetição periódica e infinita (nas duas direções do plano), do potencial desordenado gerado para a rede original de $N_x \times N_y$ sítios.

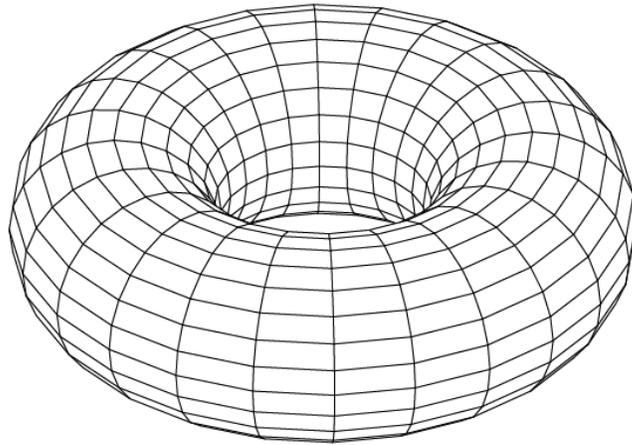


Figura 3.4: *Geometria toroidal da rede com condições de contorno periódicas.*

Um ponto fundamental a ser notado é que a periodicidade introduzida pelo fluxo magnético na função de onda eletrônica deve ser comensurável com essa periodicidade imposta à rede pelas condições de contorno.

No calibre de Landau, a fase do parâmetro de *hopping* na direção y é diferente para cada diferente posição no eixo x . Assim, quando condições de contorno periódicas são aplicadas a uma rede $N_x \times N_y$, para que o período da função de onda eletrônica sobre a rede seja compatível com o período de repetição da rede, é preciso garantir que a fase do *hopping* em $x = na$ seja igual

àquela em $x = (n + N_x) a$. Assim, há limitações nos valores de fluxo magnético ϕ/ϕ_0 que podem

ser considerados: os fluxos possíveis serão: $\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{1}{N_x}, \frac{2}{N_x}, \frac{3}{N_x}, \frac{4}{N_x}, \dots$

Ressaltamos que neste trabalho estamos interessados no limite de baixos campos magnéticos. Vale portanto frisar que o menor fluxo magnético com que se pode trabalhar neste modelo é I/N_x . Conseqüentemente, para reduzir a intensidade do fluxo considerado é necessário aumentar o tamanho da rede (pelo menos na direção x) e isto implica em aumento do tamanho da matriz a ser diagonalizada (aumento do custo computacional).

3.4 Densidade de Estados: Bandas de Landau

Nos espectros anteriormente mostrados não foi considerada nenhuma desordem no sistema. A presença de desordem modifica o espectro de energias, provocando o alargamento dos níveis de energia, que passam a formar bandas. Quanto maior a desordem considerada, maior o alargamento em energia destas bandas.

Em nossas simulações numéricas, a densidade de estados (bandas de Landau) é obtida através da contagem de estados eletrônicos por intervalo definido em energia. Constrói-se uma espécie de histograma, indicando o número de estados que ocorrem em cada pequeno intervalo que se define em energia, e este histograma torna-se uma curva suave quando são levadas em conta diversas realizações do potencial desordenado. A cada realização diferente, um novo sorteio do potencial de desordem é feito (considerando-se os mesmo parâmetros e dentro do mesmo intervalo de largura W) e as posições em energia de cada estado podem variar ligeiramente de uma realização para outra. Assim, é importante que diferentes realizações sejam acumuladas na definição da densidade de estados (em geral consideramos da ordem de 100 diferentes realizações da desordem).

Um exemplo da forma da densidade de estados que se obtém para uma desordem tipo ruído branco, com fluxo magnético $\phi/\phi_0 = 0.05$, pode ser visto na Figura (3.5). Este fluxo corresponde a $p/q = 1/20 = 0.05$, e portanto temos um total de 20 bandas de energia, sendo que mostramos nesta figura apenas metade do espectro: 10 bandas (a densidade de estados é simétrica em relação ao centro do espectro). A desordem, nesse caso, foi considerada $W/V = 0.8$.

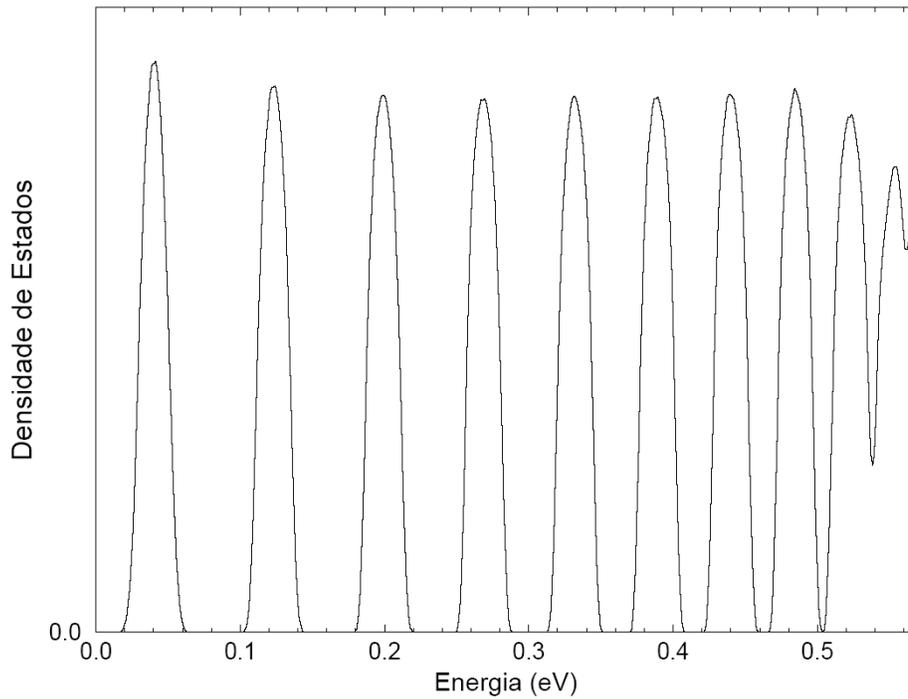


Figura 3.5: Densidade de Estados, evidenciando a definição de bandas de Landau, para uma desordem tipo ruído branco com $W/V = 0.8$. Neste caso, $\phi/\phi_0 = 0.05$, portanto tem-se 10 bandas até a metade do espectro.

3.5 Cálculo do Grau de Localização

Neste trabalho, buscou-se um método que tornasse possível a identificação de estados estendidos e localizados dentro de cada uma das bandas de Landau. Há diversas formas de se calcular o grau de localização de um estado eletrônico, entre eles: método de funções de Green recursivas, cálculo do comprimento de localização, número de Thouless, razão de participação, razão de participação inversa, matrizes de transferência. Após pesquisa na literatura (ver, por exemplo, referências [8,59]) e alguns testes realizados, adotamos a Razão de Participação como ferramenta para o cálculo sistemático do grau de localização dos estados eletrônicos dos nossos sistemas.

3.5.1 Razão de Participação

O conceito de Razão de Participação para aferir o grau de localização dos estados eletrônicos foi introduzido em 1970 por Bell e Dean [60]. Num modelo *tight-binding* com N sítios, a Razão de Participação RP é definida por (ver também referências [61,62]):

$$RP = 1/(N \sum_{i=1}^N |a_i|^4) \quad (3.11)$$

onde a_i é a amplitude de probabilidade da função de onda no sítio i . Considera-se que a função de onda seja normalizada, ou seja, que $\sum_{i=1}^N |a_i|^2 = 1$.

A RP descreve a proporção do número total de sítios do sistema que contribuem efetivamente para a função de onda (ou seja, que tem componentes significativamente diferentes de zero). O significado físico da RP pode ser mais bem compreendido se ilustrarmos dois casos limites:

i) se a função de onda de um estado for igualmente distribuída por toda a rede, com componentes idênticas ($a_i = 1/\sqrt{N}$ para todo i), então a RP assume seu valor máximo: $RP = 1$.

ii) se a função de onda for totalmente concentrada em um único sítio i' , teremos $a_{i'} = 1$ e todos os demais $a_i = 0$. Portanto, a RP assumirá seu valor mínimo: $RP = 1/N$.

Assim, os valores que a RP pode assumir variam entre $1/N$ (máximo de localização do estado eletrônico) e 1 (máximo de extensão).

Entretanto, o valor máximo da Razão de Participação de um estado é, em geral, menor do que 1. Mesmo para uma rede perfeita, ou seja, sem desordem, apenas o primeiro e o último auto-estados da banda de energias têm $RP = 1$. Os demais auto-estados são ondas estacionárias, que são superposições de ondas de Bloch, e que portanto apresentam nós. Nesse caso, o valor da RP será menor que 1 e dependerá do modo como elas são construídas. Na presença de um pequeno grau de desordem, os auto-estados serão ondas multiplamente espalhadas, e a amplitude em um determinado ponto será resultante de muitas diferentes ondas. Se o grau de desordem for aumentado, de modo que haja uma flutuação apreciável no potencial, a função de onda tenderá a se concentrar nas regiões favoráveis do potencial, diminuindo assim o valor da RP .

Calculamos então a Razão de Participação de cada um dos estados nos sistemas de nosso interesse. Um exemplo do cálculo da RP pode ser visto na Figura 3.6 a seguir, juntamente com a densidade de estados do sistema (linha contínua preta). Estão mostrados apenas os estados correspondentes à primeira banda de Landau, para um sistema com 40×40 sítios, fluxo magnético $\phi/\phi_0 = 0.05$ e grau de desordem pequeno: $W/V = 0.4$. Para este tamanho de rede e este fluxo magnético, cada banda é composta por 80 estados. Os círculos em vermelho indicam o valor da RP de cada estado: quanto menor a RP , mais localizado é este estado.

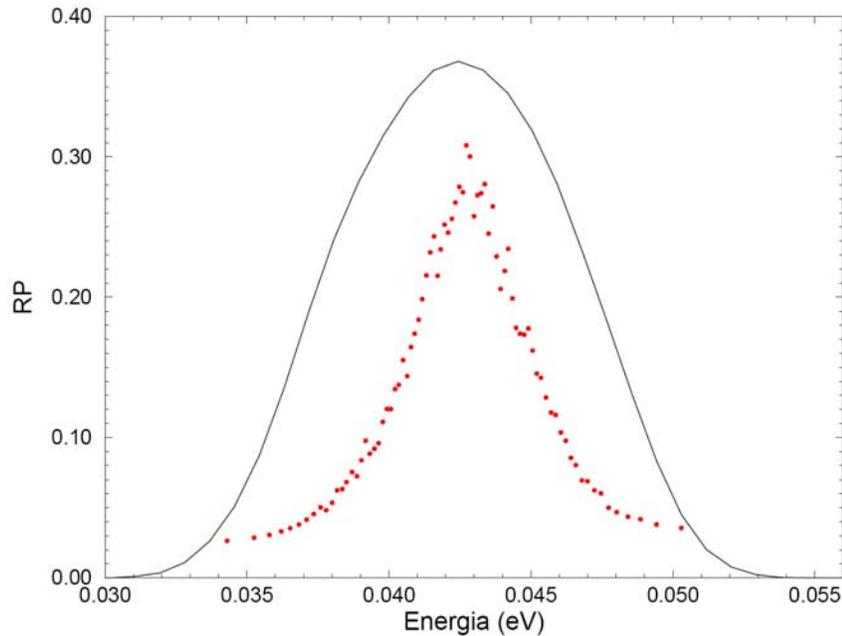


Figura 3.6: Disposição de estados estendidos e localizados na primeira banda de Landau, observada através do cálculo da Razão de Participação (círculos vermelhos). A linha contínua preta é a densidade de estados do sistema (a escala do eixo vertical indica os valores da RP, e não da densidade de estados, que foi apenas ajustada para aparecer na mesma escala). Rede com 40×40 sítios, $\phi / \phi_0 = 0.05$ e $W/V = 0.4$

Evidencia-se, neste exemplo da Figura 3.6, a formação de uma divergência na RP na região central da banda. Essa divergência sinaliza a existência de estados estendidos no centro da banda, exatamente como previsto para a explicação do Efeito Hall Quântico (vide Figura 1.6c). E conforme se afastam do centro, tendendo aos extremos da banda, os estados são cada vez mais localizados.

Os valores de RP mostrados neste exemplo correspondem a uma média sobre 100 diferentes realizações (sorteios) do potencial desordenado.

Na Figura 3.7, olhamos para o cálculo da RP em uma única realização de desordem, onde são mostrados os estados correspondentes às três primeiras bandas de Landau, de um sistema com 40×40 sítios, $\phi/\phi_0 = 0.05$ e desordem correlacionada, com $W/V = 1.6$ e comprimento de correlação $\lambda=2$. A distribuição das RP's é, naturalmente, mais ruidosa do que quando se calcula a média sobre diversas realizações. Para melhor visualizarmos o significado da Razão de Participação, para cada um dos estados indicados por setas em vermelho, graficamos a seguir, na Figura 3.8, a amplitude de probabilidade das funções de onda correspondentes.

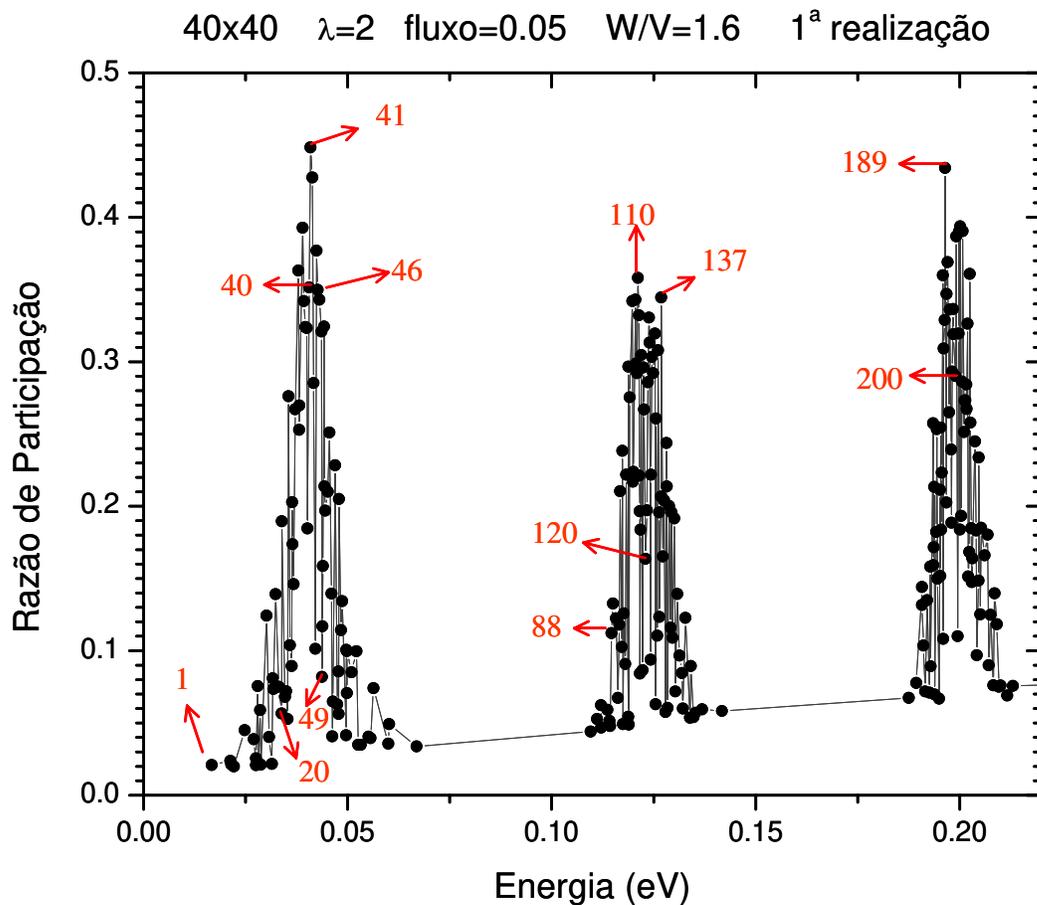
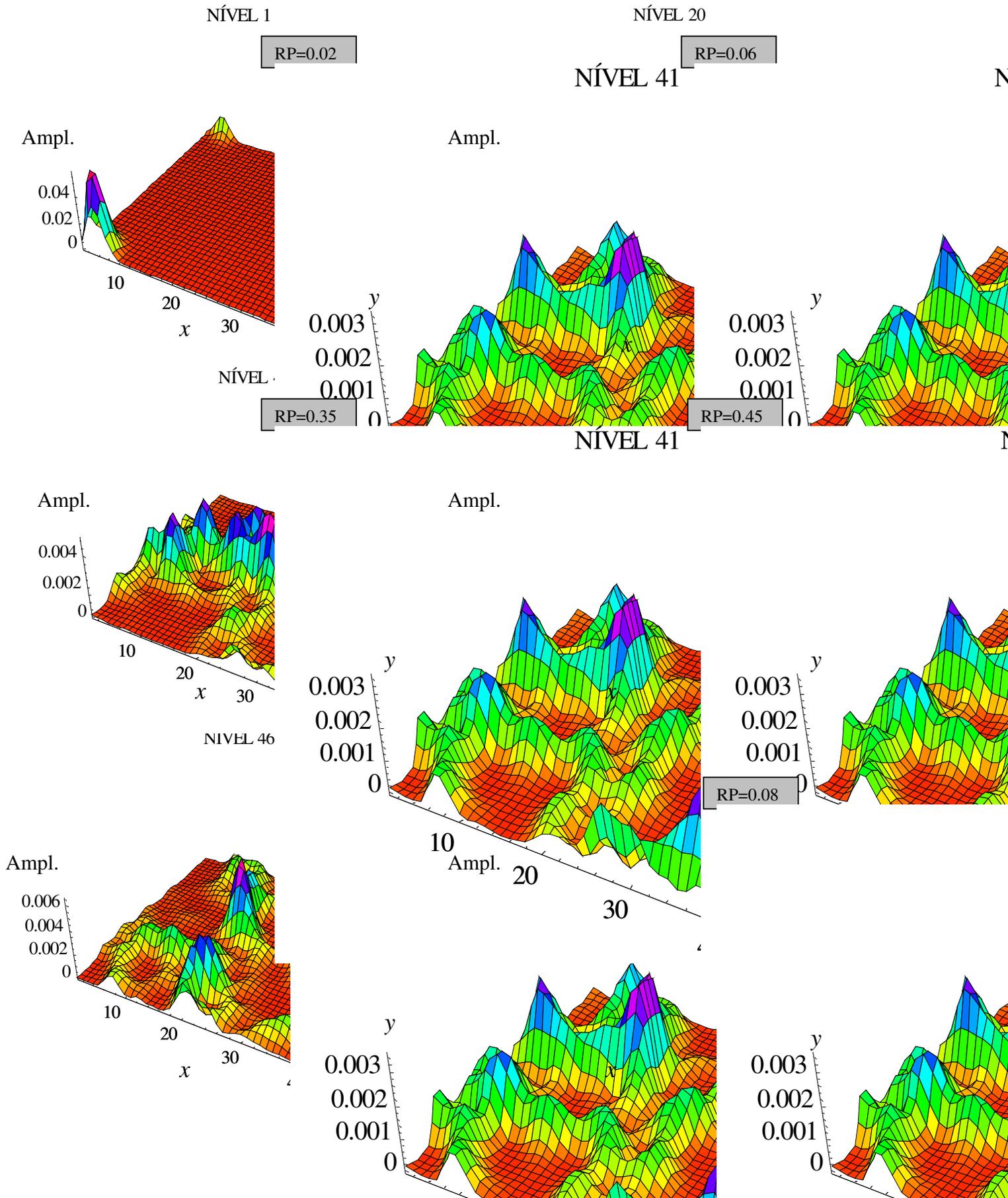
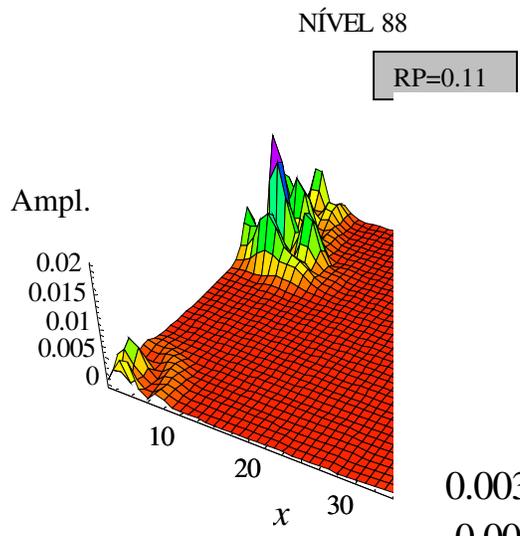


Figura 3.7: Razão de Participação, para uma única realização de desordem. São mostrados os estados das 3 primeiras bandas de Landau. Cada estado indicado em vermelho teve a amplitude de probabilidade de sua função de onda graficada a seguir.

Figura 3.8: Amplitudes de probabilidade das funções de onda dos estados indicados na Figura 3.7

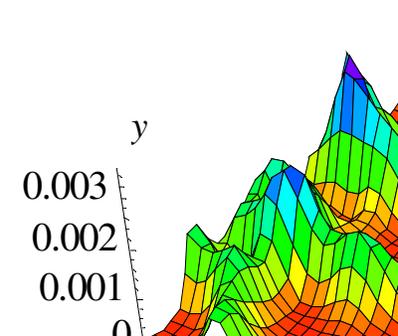
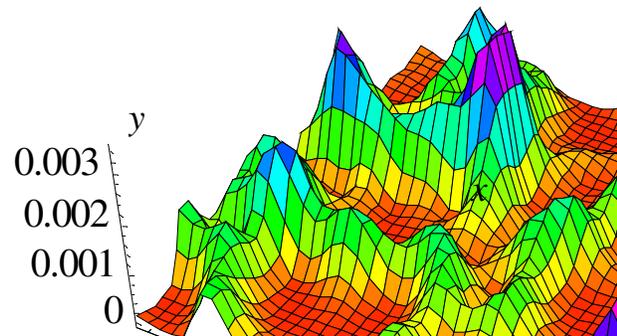
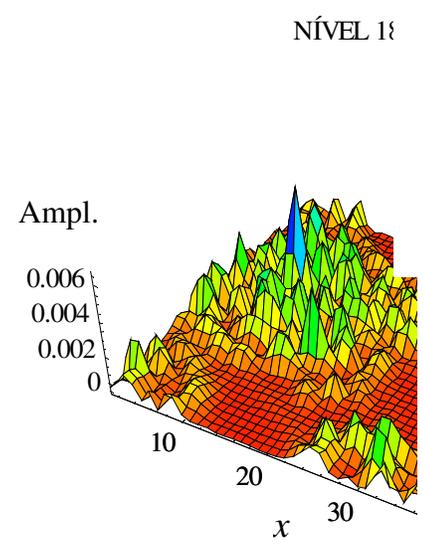
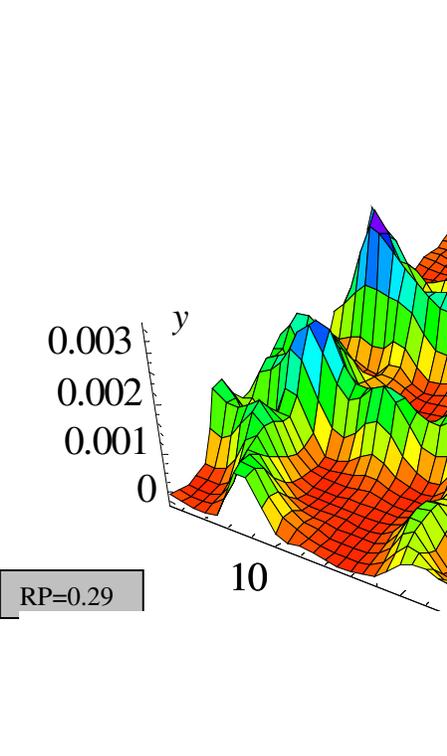
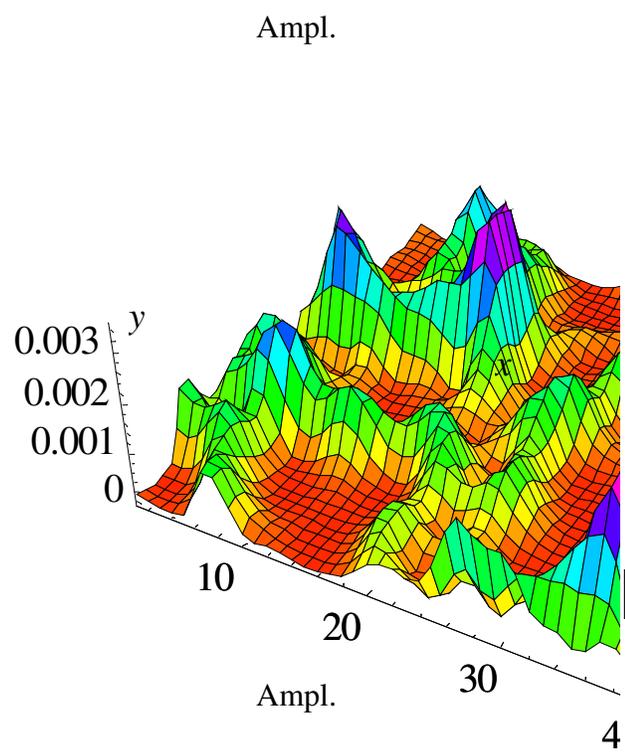
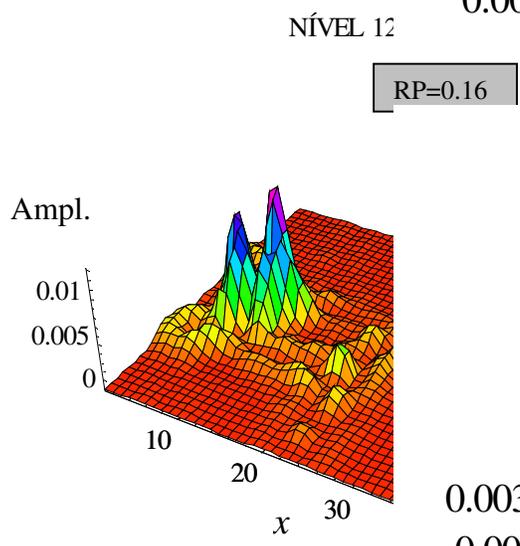
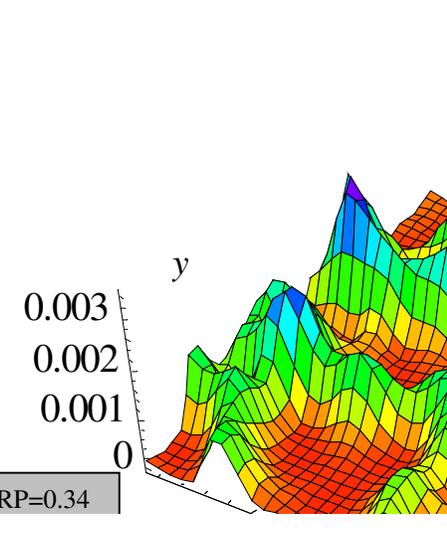
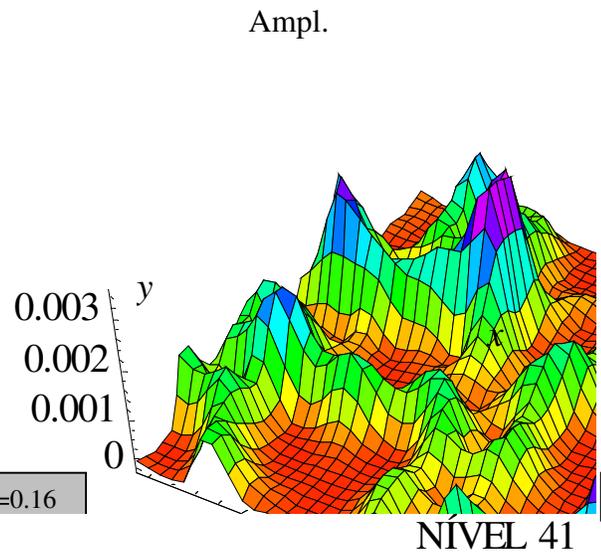




NÍVEL 110

RP=0.36

NÍVEL 41



Juntamente com cada um dos gráficos da amplitude de probabilidade da função de onda, está indicado o valor da RP (no retângulo cinza) correspondente àquela função de onda. O número do nível (estado) indicado serve para identificação no gráfico da Figura 3.7. A diferença entre a função de onda de estados localizados e estendidos é clara. Ganha-se, com a observação cuidadosa dessas figuras, maior confiança da utilização da Razão de Participação como indicativo do grau de localização dos estados.

3.5.2 Número de Thouless

Uma outra ferramenta que implementamos para o cálculo do comprimento de localização dos estados eletrônicos nos sistemas que estudamos foi o número de Thouless. O número de Thouless $g(E)$ é definido por:

$$g(E) = \frac{\Delta E(E)}{u(E)} \quad (3.12)$$

onde $\Delta E(E)$ é a diferença nos níveis de energia individuais devida a variações nas condições de contorno do sistema (de periódicas para anti-periódicas) e $u(E)$ é a separação local entre níveis de energia [63]. O Número de Thouless é pequeno para estados localizados, uma vez que estes estados não se estendem até as bordas do sistema. Em contrapartida, é relativamente grande para estados estendidos, pois estes se estendem pelo sistema até suas bordas, sendo assim sensíveis às variações nas condições de contorno. O cálculo do Número de Thouless não envolve a necessidade de se calcularem os autovetores na diagonalização das matrizes, mas somente os autovalores para as duas diferentes condições de contorno.

A Razão de Participação é a quantidade utilizada nos cálculos que serão apresentados nesse trabalho. Porém, calcular o grau de localização dos estados através de outra ferramenta tem como objetivo estabelecer uma comparação com os resultados obtidos com a Razão de Participação e assim, alguns resultados serão comparados no Capítulo 4.

Capítulo 4

Análise Quantitativa da Levitação

4.1 Identificação da Levitação

No capítulo anterior discutimos a abordagem numérica utilizada para tratar os sistemas de interesse e seus limites de validade. O modelo de rede utilizado permite o cálculo da densidade de estados (bandas de Landau) e da Razão de Participação correspondente à função de onda de cada estado. Com isso, pode ser identificada a posição dos estados estendidos (divergência na RP) em relação às bandas de Landau.

A proposta de levitação prevê que conforme o campo magnético é reduzido ou a desordem aumentada nos sistemas, os estados estendidos deixam de ocupar o centro das bandas, deslocando-se na direção de mais altas energias. Na tentativa de identificar estes possíveis deslocamentos, variamos o grau de desordem (a largura W da distribuição das energias na rede) e o fluxo magnético considerados nas simulações. Estes parâmetros foram variados varrendo-se uma vasta gama de valores, e alguns resultados, mostrando apenas a primeira banda de Landau, são apresentados nas Figuras 4.1 e 4.2 a seguir.

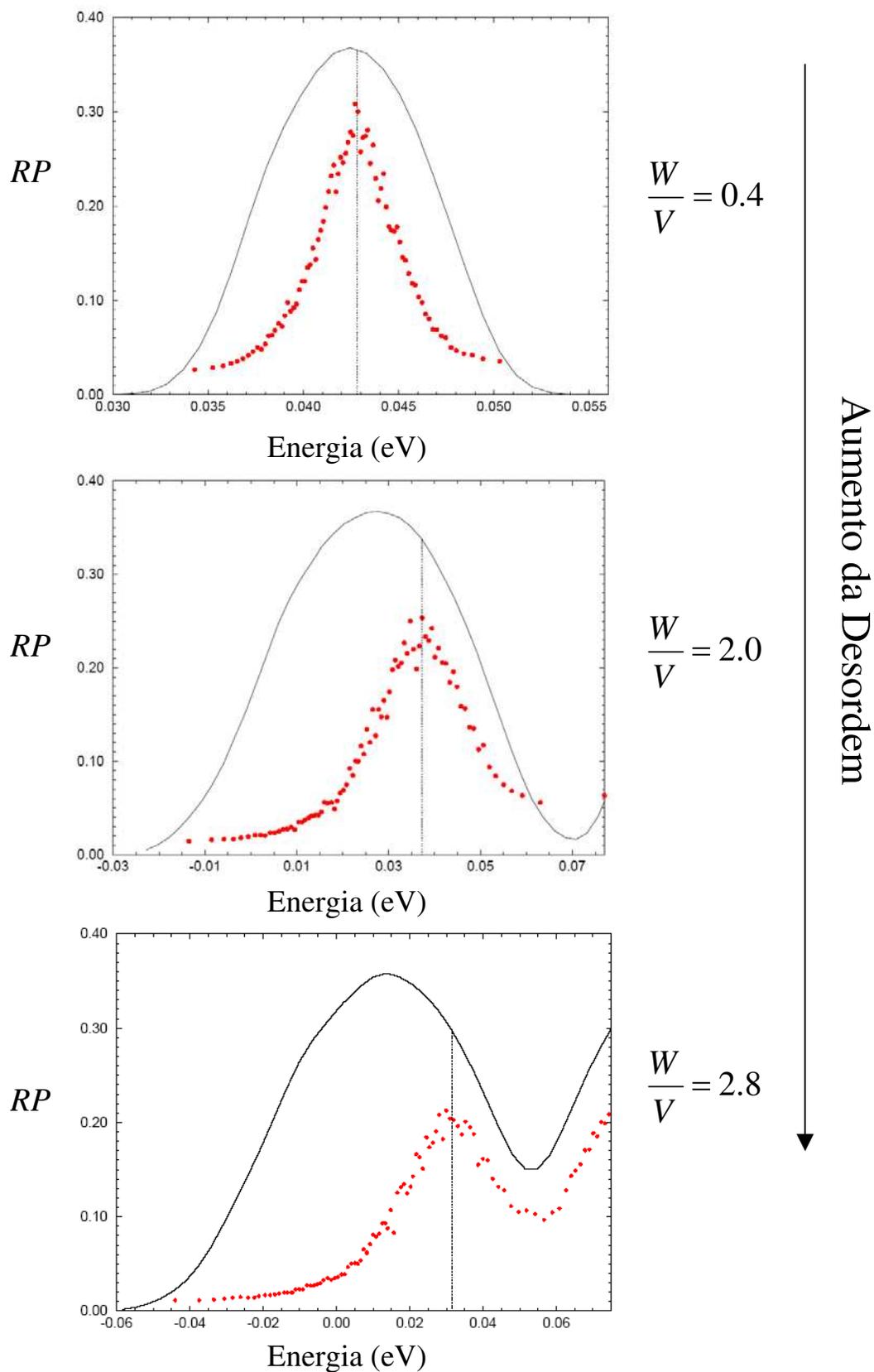


Figura 4.1: Efeito do aumento da desordem sobre a Razão de Participação (círculos vermelhos) e a Densidade de Estados (linha preta), na primeira banda de Landau de um sistema 40×40 com $\phi / \phi_0 = 0.05$. A linha pontilhada indica a posição do pico dos estados estendidos e evidencia a levitação.

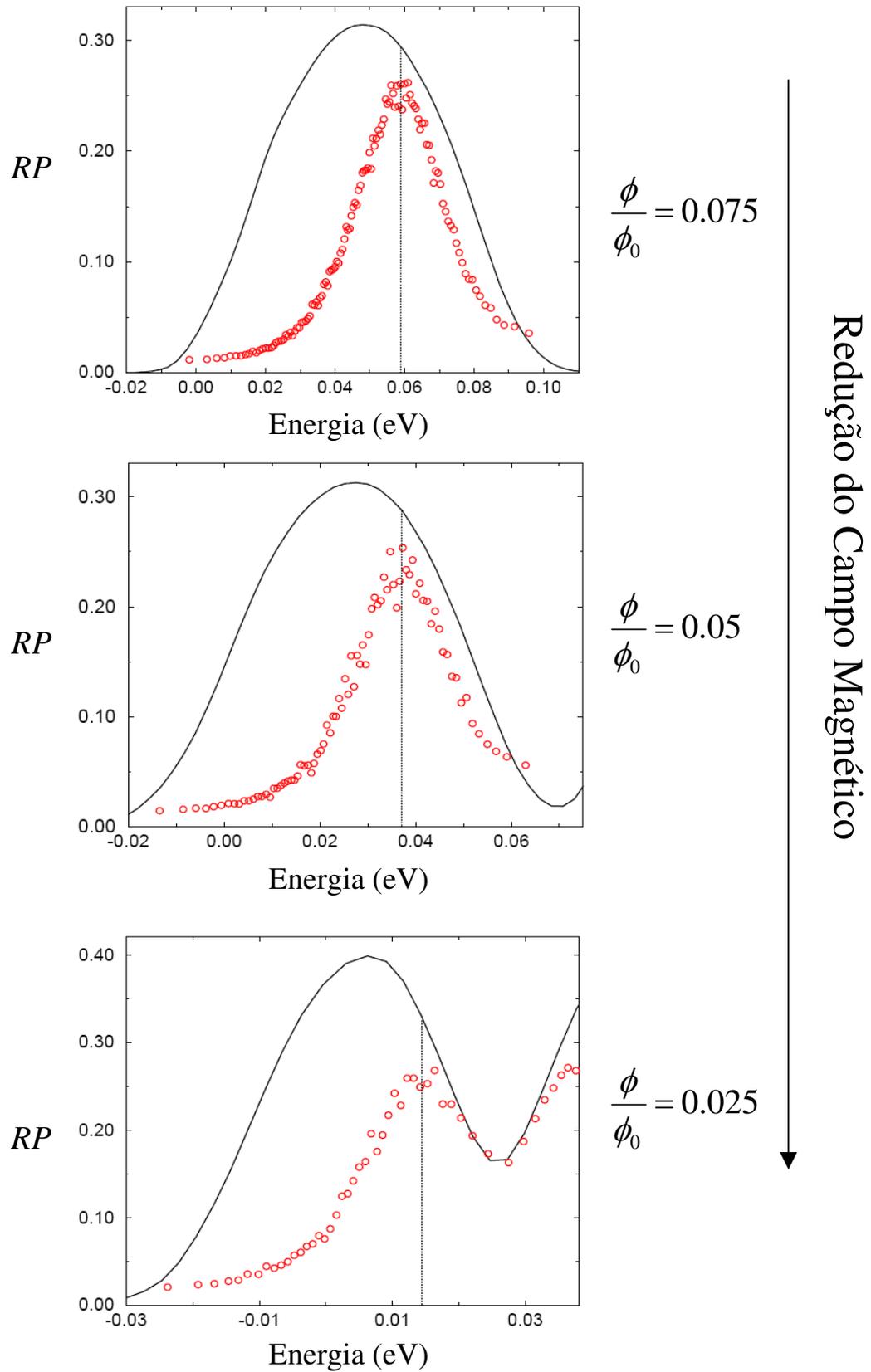


Figura 4.2: Efeito da redução do campo magnético sobre a Razão de Participação e a Densidade de Estados, na primeira banda de Landau de um sistema 40×40 e desordem fixa $W/V = 2.0$. A linha pontilhada indica a posição do pico dos estados estendidos e evidencia a levitação.

A Figura 4.1 mostra a densidade de estados na região da primeira banda de Landau, juntamente com a Razão de Participação dos estados correspondentes, para três diferentes valores de desordem (desordem tipo ruído branco). Nos três gráficos, o fluxo magnético considerado foi $\phi/\phi_0 = 0.05$, em um sistema de 40×40 sítios. A posição dos estados estendidos (pico na Razão de Participação) é indicada pela linha pontilhada. O mecanismo de levitação é claramente identificado: percebe-se que o aumento da desordem provoca um deslocamento dos estados estendidos a partir do centro da banda de Landau. Conforme a desordem é aumentada, as bandas de Landau se alargam e assim, naturalmente, as escalas em energia dos três gráficos mostrados na Figura 4.1 são diferentes. Na situação de maior desordem mostrada ($W/V = 2.8$), vê-se que o alargamento das bandas já é tal que começa a ocorrer sobreposição entre as densidades de estados da primeira e da segunda banda de Landau. Entretanto, é importante notar que a levitação é observada mesmo antes da sobreposição das bandas.

Analogamente à Figura 4.1, na Figura 4.2 são mostradas evidências da levitação, porém agora com a desordem mantida fixa ($W/V = 2.0$), enquanto o fluxo magnético no sistema é gradativamente reduzido. Nesse caso, para a rede 40×40 , consideraram-se os fluxos $\phi/\phi_0 = 3/40 = 0.075$, $\phi/\phi_0 = 2/40 = 0.05$ e $\phi/\phi_0 = 1/40 = 0.025$. Mais uma vez, o deslocamento dos estados estendidos (levitação) pode ser identificado. Como foi discutido na seção 3.3.2, devido às condições de contorno periódicas, o menor fluxo possível a ser considerado para a rede 40×40 , é $1/40$. Alguns resultados considerando fluxos menores foram também analisados neste trabalho, a um alto custo de tempo computacional, considerando redes 60×60 e até 80×80 .

As escalas dos diferentes gráficos da Figura 4.2 também variam, pois a redução do campo magnético implica em aproximação e estreitamento dos níveis de Landau.

A fim de comprovar a abrangência e validade da utilização da Razão de Participação para identificar a levitação, mostramos agora uma comparação com resultados obtidos a partir de outra quantidade: o número de Thouless (ver seção 3.5.2). As Figuras 4.3a e 4.3b mostram, respectivamente, o cálculo que fizemos da Razão de Participação (círculos vermelhos) e do Número de Thouless (círculos azuis), para um mesmo sistema. O sistema em questão é uma rede de 40×40 sítios, considerando-se uma desordem correlacionada, de amplitude $W/V = 3.2$ e

comprimento de correlação na desordem $\lambda = 1$. O fluxo magnético considerado em ambos os casos foi $\phi/\phi_0 = 0.05$. Desse modo, as figuras mostram a densidade de estados (linha preta) até a quarta banda de Landau, juntamente com o grau de localização dos estados, calculado através destas duas diferentes ferramentas.

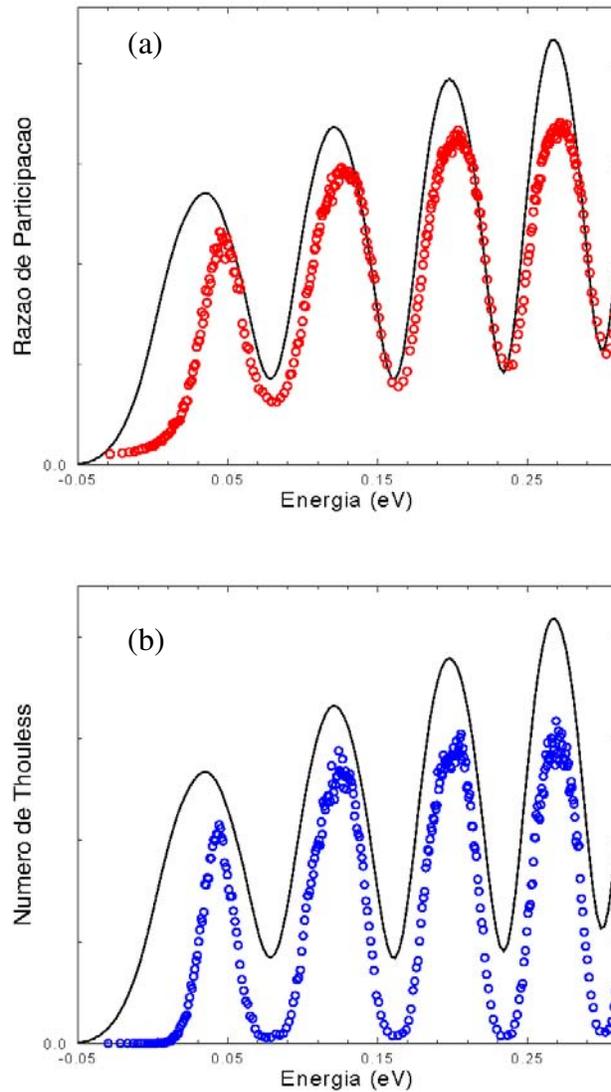


Figura 4.3: Confronto de ferramentas utilizadas para cálculo do comprimento de localização: (a) Razão de Participação (b) Número de Thouless.

A comparação direta mostra que ambas apresentam equivalentemente uma boa definição dos picos que indicam as posições dos estados estendidos e que estes se apresentam, como esperado, nas mesmas posições. É importante verificar que os mesmos resultados são obtidos a partir de ferramentas diferentes. Esse confronto de ferramentas fortalece os resultados que obtivemos utilizando a Razão de Participação.

4.2 Escalas de Energia

Para quantificar o processo de levitação, passamos a calcular a diferença em energia, δE_N , entre o pico na Razão de Participação (energia do estado estendido: linha pontilhada) e o centro da N -ésima banda de Landau (definido na densidade de estados), e a acompanhar a evolução de δE_N com a variação de desordem e campo magnético.

As duas escalas de energia relevantes envolvidas no problema, com as quais iremos comparar δE_N , estão indicadas na Figura 4.4 a seguir. São elas: a separação $\hbar\omega_c$ entre as bandas de Landau e o alargamento Γ_N da N -ésima banda, que depende da desordem e do campo magnético. Observamos que a largura das bandas (Γ_N) varia linearmente com a amplitude W de flutuação de desordem e com a raiz quadrada do campo magnético B [54].

Vimos que uma forma elegante e geral para quantificar os resultados da levitação seria observando a levitação relativa ao alargamento $\frac{\delta E_N}{\hbar\omega_c}$, em função da razão entre as escalas de energia $\hbar\omega_c/\Gamma_N$.

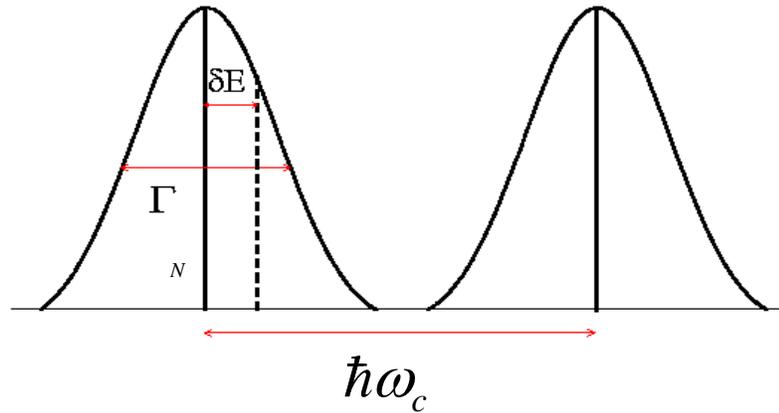


Figura 4.4: Esquema mostrando duas bandas de Landau, com indicação das escalas de energia relevantes ao problema: Γ_N - a largura da N -ésima banda, definida a meia altura, e $\hbar\omega_c$ - a separação entre as bandas. δE é o desvio da posição dos estados estendidos, indicado pela linha pontilhada, em relação ao centro da banda.

Desta maneira, o limite $\hbar\omega_c/\Gamma_N \gg 1$ corresponde à situação em as bandas de Landau estão bem separadas, ou seja, altos campos magnéticos e/ou desordens pequenas. E por outro lado, quando a razão $\hbar\omega_c/\Gamma_N$ diminui, e se aproxima de 1, a superposição entre as bandas começa a ficar importante.

A Figura 4.5 mostra a análise feita da levitação na primeira banda de Landau ($N = 0$), no modelo de desordem tipo ruído branco. É interessante notar que todos os desvios calculados, considerando-se diferentes parâmetros de desordem e fluxo magnético, são bem ajustados por uma curva do tipo (a linha contínua no gráfico é o ajuste feito):

$$\frac{\delta E_0}{\hbar\omega_c} \propto \frac{1}{(\hbar\omega_c/\Gamma_0)^2} \quad (4.1)$$

onde a constante de proporcionalidade obtida no ajuste foi $\alpha = 0.37$.

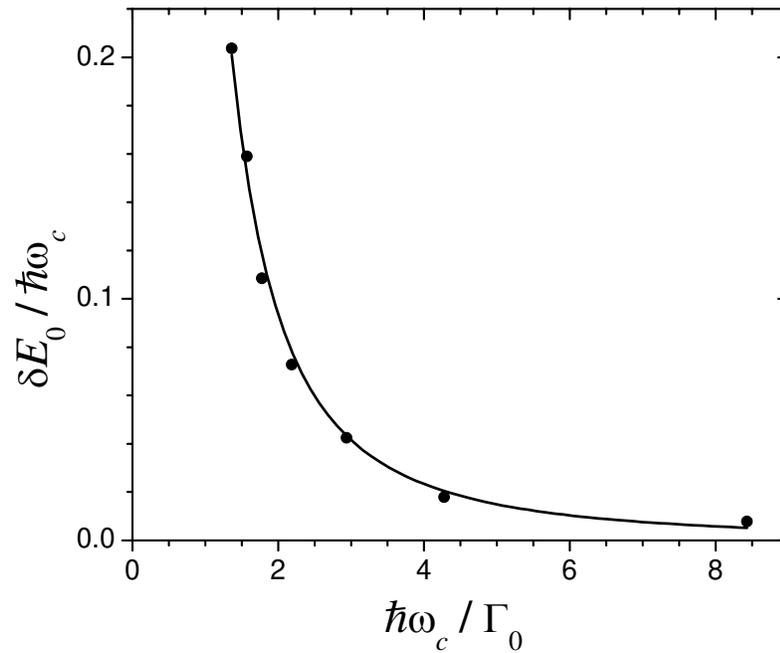


Figura 4.5: Levitação na primeira banda de Landau, em função da razão entre as escalas de energia do problema. Desordem tipo ruído branco.

Ressaltamos que expressar os resultados da levitação em função da razão $\hbar\omega_c/\Gamma_N$, conforme prepusimos neste trabalho, é mais abrangente do que a obtenção da dependência apenas com os parâmetros W/V e B , discutida nos demais trabalhos numéricos existentes até então. Além disso, considerar $\hbar\omega_c/\Gamma_N$ torna possível uma comparação mais direta com resultados experimentais, uma vez que o alargamento das bandas e a distância entre elas são parâmetros que podem ser determinados experimentalmente.

4.3 Escalas de Comprimento

Os resultados mostrados na Figura 4.5 são obtidos considerando-se o modelo de desordem ruído branco, ou seja, uma desordem que varia aleatoriamente no intervalo de energias W , sem considerar nenhuma correlação entre a energia de um sítio e a de sítios vizinhos. Conforme foi discutido no Capítulo 3, fizemos cálculos também considerando a introdução de correlação no potencial de desordem.

A suavização do potencial de desordem correlacionado tem efeitos importantes sobre a densidade de estados do sistema. Um dos efeitos é que as bandas se tornam mais estreitas quando comparadas ao modelo ruído branco (para uma mesma largura W no sorteio das energias). Outro efeito importante é a redução da largura da banda com o aumento do índice do nível de Landau [54], que pode ser observado na Figura 4.3. Estes comportamentos estão de acordo com os resultados de Ando e Uemura [64], que realizaram um amplo estudo das características do alargamento dos níveis de Landau, discutindo sua dependência com o comprimento de correlação do potencial desordenado. De qualquer maneira, continuamos a observar uma dependência linear entre o alargamento das bandas e a amplitude de flutuação W do sorteio da desordem.

Com relação ao processo levitação dos estados estendidos, uma importante observação é feita no caso de desordem correlacionada: os desvios em energia diminuem com o aumento do comprimento de correlação λ . Acompanhamos a evolução dos estados estendidos, do mesmo modo descrito anteriormente, para diversos comprimentos de correlação diferentes. A Figura 4.6 a seguir mostra que, para cada λ considerado, os desvios δE_0 dos estados estendidos da primeira banda de Landau são sempre bem ajustados pelo mesmo tipo de curva da Eq. (4.1):

$$\frac{\delta E_0}{\hbar \omega_c} = \frac{\alpha}{(\hbar \omega_c / \Gamma_0)^2}. \quad (4.2)$$

Porém, a constante de proporcionalidade α torna-se menor quanto maior o comprimento de correlação considerado.

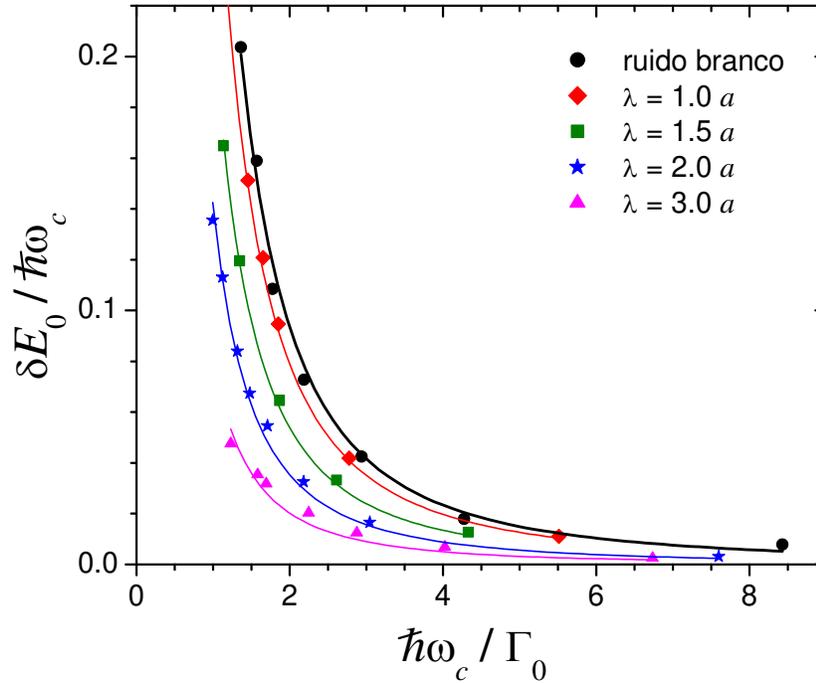


Figura 4.6: Levitação na primeira banda de Landau, em função da razão entre as escalas de energia do problema. Comparação entre diferentes perfis de desordem: a magnitude de levitação diminui com o comprimento de correlação λ .

Se a comparação entre diferentes modelos de desordem fosse em função de W/V , poderia-se pensar que a levitação diminui com λ por causa do estreitamento da banda observado. Entretanto deve-se notar que este efeito já é descontado na maneira em que a comparação é estabelecida aqui na Figura 4.6. A escolha do eixo x neste gráfico nos assegura que estamos olhando para casos onde o alargamento é equivalente. Portanto, mesmo quando os alargamentos das bandas são iguais, o desvio δE_0 diminui com o aumento do comprimento de correlação.

Para a desordem tipo ruído branco, a equivalência no ajuste da curva na Figura 4.5, entre variações no fluxo magnético e na desordem, é observada. Resultados para diferente fluxos e diferentes amplitudes de desordem colapsam sobre uma mesma curva. Para comprimentos de correlação finitos, entretanto, esta equivalência não vale mais, devido ao novo comprimento de escala introduzido por λ .

As escalas de comprimento relevantes ao problema são: o comprimento de correlação λ no potencial de desordem e o comprimento magnético $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$, determinado pela intensidade do campo magnético. Assim como no caso das escalas de energia, observamos que a razão entre as escalas de comprimento, l_B/λ , é uma quantidade útil para entender o mecanismo de levitação. A partir da Figura 4.6, obtivemos as diversas constantes de proporcionalidade α no ajuste das diferentes curvas mostradas. A Figura 4.7 mostra que a dependência de α com l_B/λ é linear.

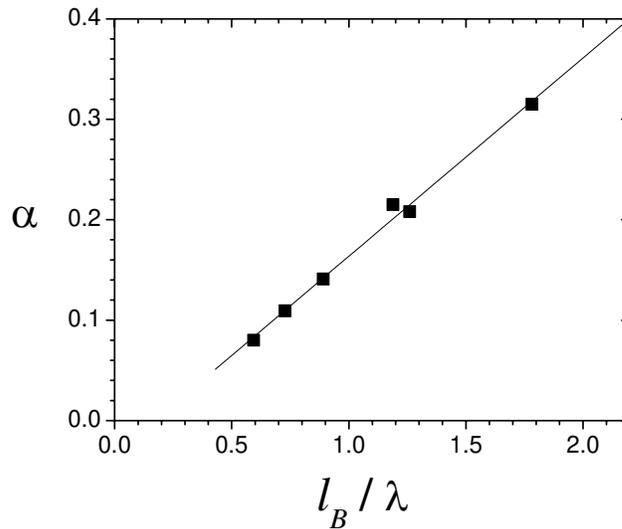


Figura 4.7: Dependência linear de α com a razão entre os comprimentos de escala l_B/λ . Para

cada valor de λ , α é a constante de ajuste das curvas $\frac{\delta E_0}{\hbar \omega_c} = \frac{\alpha}{(\hbar \omega_c / \Gamma_0)^2}$.

4.4 Levitação no Primeiro Nível de Landau

Uma vez obtida a dependência da levitação com os comprimentos de escala vista na seção anterior, uma relação geral para os desvios δE_0 pode ser recuperada, válida para todos os campos magnéticos e comprimentos de correlação no intervalo pesquisado. De fato, a Figura 4.8

mostra que todos os desvios de estados estendidos colapsam sobre a mesma curva:

$$\frac{\delta E_0}{\hbar \omega_c} \propto \frac{l_B}{\lambda} \left(\frac{\Gamma_0}{\hbar \omega_c} \right)^2, \quad (4.3)$$

sendo que a constante de proporcionalidade, obtida pelo ajuste dos dados, é 0.17.

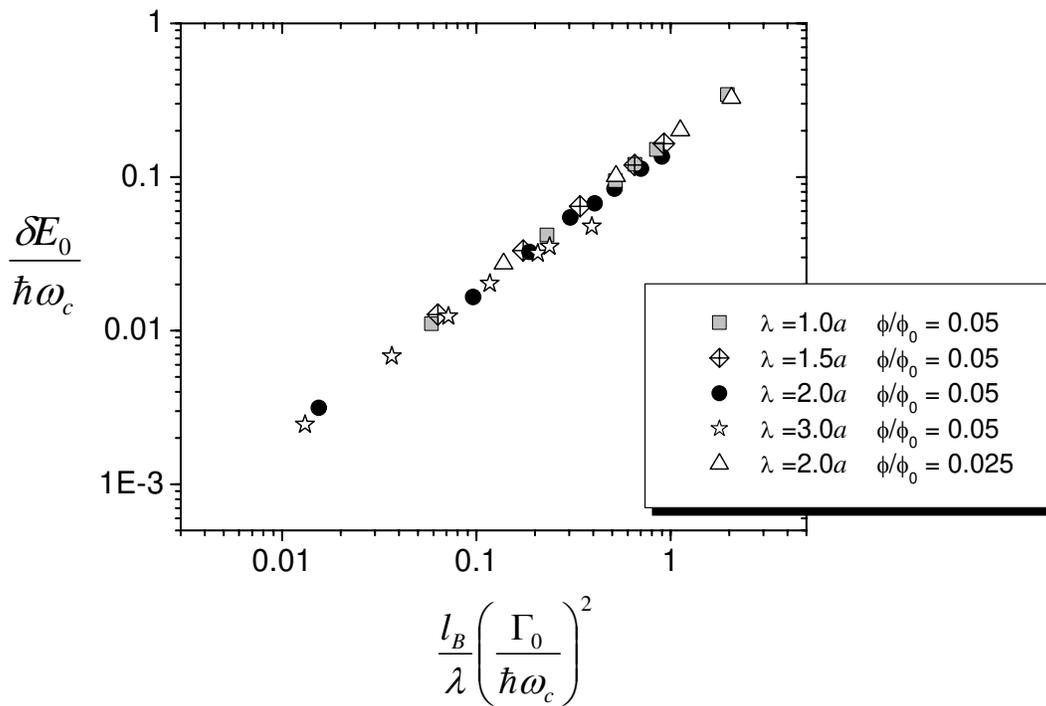


Figura 4.8: Dependência global dos desvios em energia dos estados estendidos com os diversos parâmetros relevantes.

Com este resultado, mapeamos de forma bastante abrangente o comportamento da levitação de estados estendidos no primeiro nível de Landau. Uma pequena saturação na levitação pode ser observada para $\lambda = 3a$ na Figura 4.8, porém acreditamos que isso possa estar refletindo o fato de efeitos de tamanho serem mais importantes para comprimentos de correlação maiores.

4.5 Levitação nos Demais Níveis de Landau

Utilizando o modelo de desordem correlacionada, os picos na RP são bem definidos para as demais bandas de Landau além da primeira, permitindo a análise da levitação. Na Figura 4.9 apresentamos um exemplo mostrando a Densidade de Estados e a boa definição dos picos na Razão de Participação, para as quatro primeiras bandas de Landau de um sistema com fluxo magnético = 0.05, desordem $W/V = 3.6$ com comprimento de correlação $\lambda = 2a$.

Seguindo o mesmo procedimento descrito para quantificar a levitação dos estados estendidos da primeira banda, podemos também acompanhar a evolução dos estados estendidos nos demais níveis de Landau. A Figura 4.10 mostra os desvios em energia δE_N na primeira ($N = 0$) e na segunda ($N = 1$) bandas, calculados para diferentes amplitudes W da desordem num sistema com correlação $\lambda = 2a$ e fluxo magnético = 0.05. Observa-se uma levitação menos pronunciada no segundo nível de Landau em comparação com a o primeiro nível. Deve-se notar que o alargamento da segunda banda é menor que o da primeira, $\Gamma_1 < \Gamma_0$. Todavia, este fato já é levado em consideração no tipo de análise feita e, mesmo assim, a levitação mostra-se intrinsecamente menor com o aumento do índice de Landau.

É interessante notar na Figura 4.10 que, apesar de serem menores que os da primeira banda, os desvios em energia na segunda banda de Landau apresentam o mesmo tipo de dependência com as escalas de energia: $\frac{\delta E_1}{\hbar\omega_c} \propto \frac{1}{(\hbar\omega_c/\Gamma_0)^2}$.

Verificamos uma levitação ainda menor na terceira banda de Landau. Esta evidência, de que a levitação é reduzida conforme o índice N aumenta, tem importantes implicações no entendimento do problema. Por um lado esta observação contradiz a conjectura inicial para a levitação [12,13]. Mas por outro lado, concorda com resultados experimentais que verificam uma maior levitação para a primeira banda de Landau. A extrapolação desse comportamento observado implica em um Diagrama de Fases para o efeito Hall quântico que permite transições diretas $\nu > 1$ para o isolante.

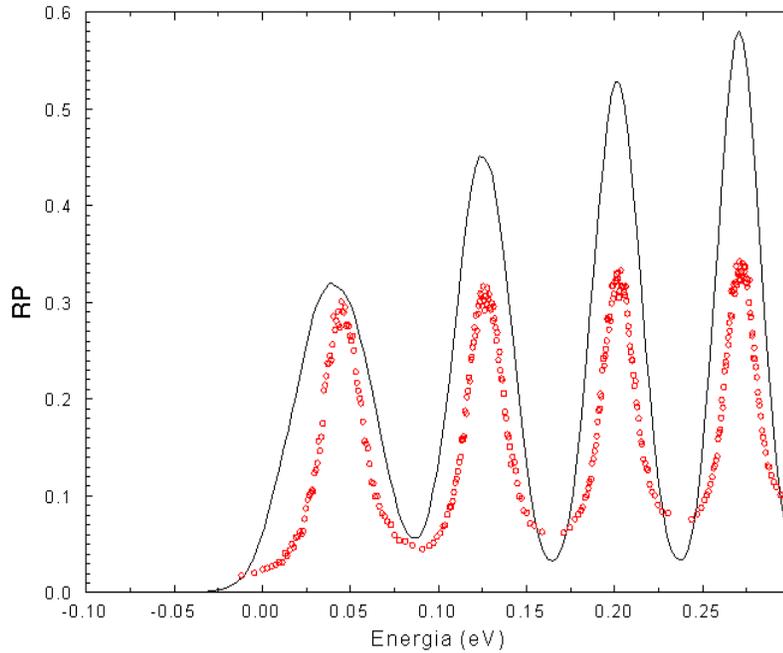


Figura 4.9: Densidade de Estados e da Razão de Participação nas quatro primeiras bandas de Landau, para um sistema com 40×40 sítios, $\text{fluxo}=0.05$, $W/V = 3.6$ e $\lambda = 2a$.

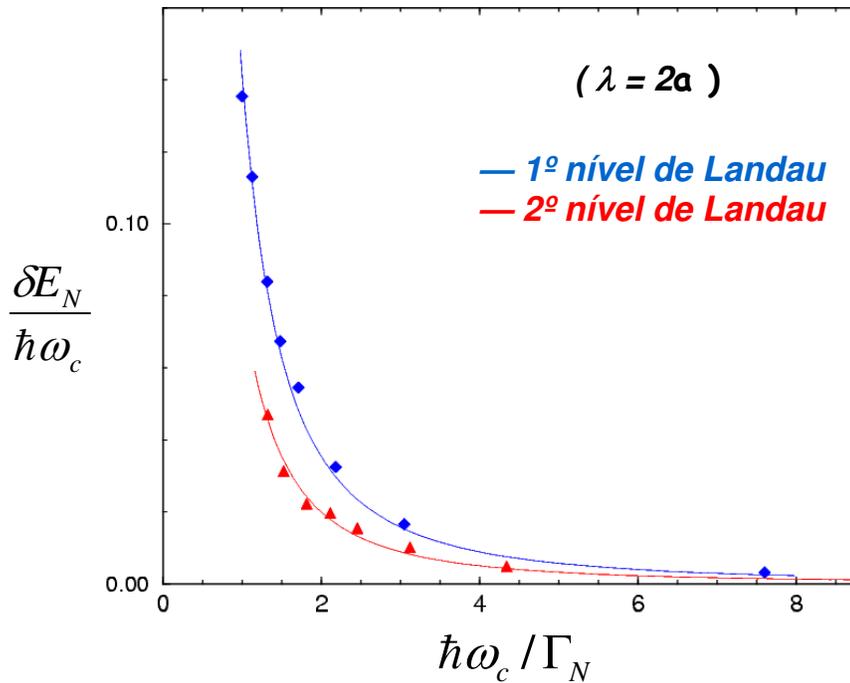


Figura 4.10: Levitação dos estados estendidos da primeira e da segunda banda de Landau, em função da razão entre as escalas de energia do problema. Fluxo=0.05 e $\lambda = 2a$.

Analisando gráficos do tipo deste na Figura 4.10 para outros comprimentos de correlação, observamos a levitação maior na primeira banda do que na segunda (e assim sucessivamente), é um comportamento que está sempre presente. Porém, um exame mais cuidadoso da razão $\delta E_1 / \delta E_0$, mostra que esta razão varia para os diferentes comprimentos de correlação, como mostra a Figura 4.11. No caso da desordem ruído branco observa-se um limite superior, onde a levitação é igualmente intensa em ambas as bandas. A evolução de $\delta E_1 / \delta E_0$ é similar à variação de Γ_1 / Γ_0 com o comprimento de correlação, observado na referência [64]. De fato, verificamos que $\delta E_1 / \delta E_0 \propto (\Gamma_1 / \Gamma_0)^4$.

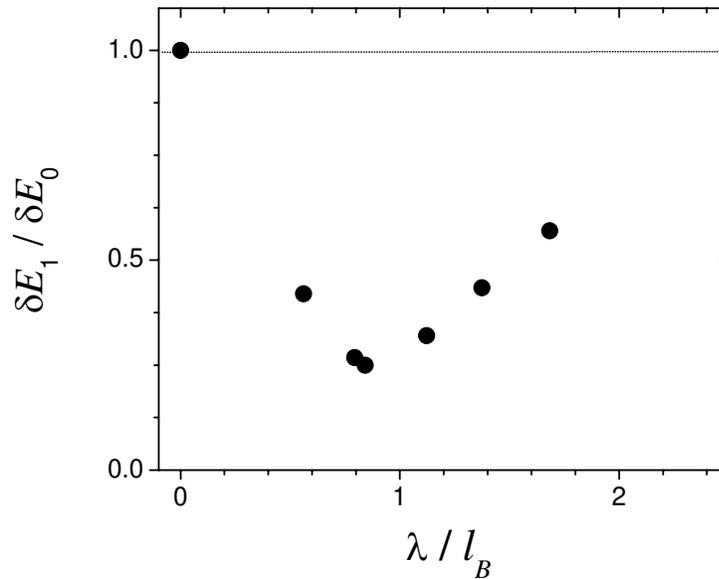


Figura 4.11: Razão entre a levitação dos estados estendidos da segunda e da primeira banda de Landau, em função da razão entre as escalas de comprimento do problema.

Percebemos então que considerar a razão Γ_N/Γ_0 é essencial para recobramos uma expressão geral para a levitação, agora incluindo os diferentes níveis de Landau. A generalização que obtivemos é a seguinte (com $\beta = 0.17$):

$$\frac{\delta E_N}{\hbar\omega_c} = \beta \frac{l_B}{\lambda} \left(\frac{\Gamma_N}{\hbar\omega_c} \right)^2 \left(\frac{\Gamma_N}{\Gamma_0} \right)^2. \quad (4.4)$$

A validade desta relação é verificada na Figura 4.12, onde são mostrados resultados para a levitação na segunda e terceira bandas de Landau. Todos colapsam sobre a linha pontilhada, que corresponde ao ajuste obtido na Figura 4.8 para a levitação na primeira banda de Landau.

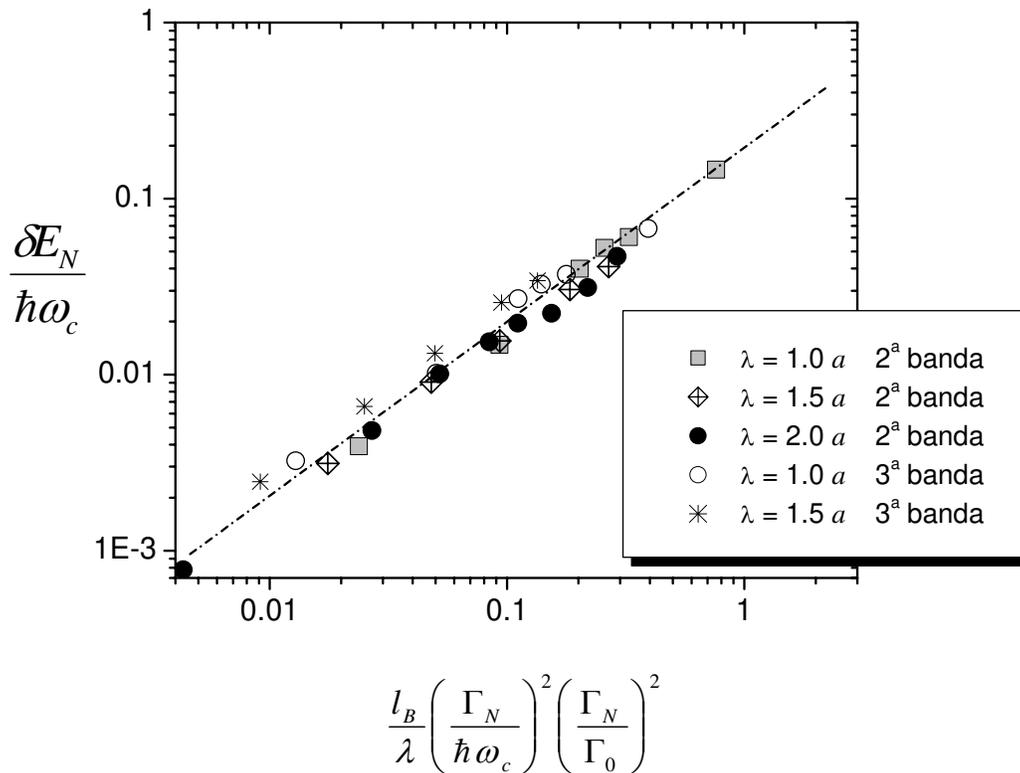


Figura 4.12: Razão entre a levitação dos estados estendidos da segunda e da primeira banda de Landau, em função da razão entre as escalas de comprimento do problema.

Conclusões da Parte I

Nesta primeira parte do trabalho investigamos o destino dos estados estendidos no regime Hall quântico, no limite de campo magnético tendendo a zero ou de sistemas fortemente desordenados.

Vimos que, na região de interesse (baixos campos magnéticos), o modelo de rede utilizado descreve bem o limite contínuo dos espectros de energia, reproduzindo os níveis de Landau em toda a região de parâmetros adotados.

Observamos a desordem dar origem a bandas de Landau alargadas, sendo o formato dessas bandas dependente do comprimento de correlação na desordem, em concordância com o detalhado estudo realizado por Ando e Uemura [64] sobre a densidade de estados nestes sistemas. Calculamos a Razão de Participação, demonstrando que trata-se de uma ferramenta capaz de indicar com clareza as posições dos estados estendidos e localizados nas diferentes bandas de Landau. No que se refere a abordagens numéricas, este trabalho encerra a polêmica que se estabeleceu há alguns anos sobre a existência ou não da levitação [16]. Com os cálculos aqui discutidos, foi possível identificar inequivocamente o processo de levitação de estados estendidos, observando-se deslocamentos da posição dos estados estendidos em relação ao centro das bandas de Landau, conforme o campo magnético é reduzido ou a desordem torna-se significativa. Esta levitação ocorre antes mesmo das bandas começarem a se superpor.

Definimos as escalas de energia (razão $\hbar\omega_c/\Gamma_N$) e de comprimento (razão l_B/λ) relevantes para quantificar o processo de levitação. Esta definição foi importante, pois antes da publicação de nosso trabalho [42,43], os demais trabalhos numéricos vinham acompanhando a levitação apenas em função da amplitude W da desordem [32-40]. Analisando a levitação em nosso modelo, conseguimos observar um comportamento universal (Eq. (4.4)) válido para toda a vasta gama de parâmetros considerados:

$$\frac{\delta E_N}{\hbar \omega_c} = \beta \frac{l_B}{\lambda} \left(\frac{\Gamma_N}{\hbar \omega_c} \right)^2 \left(\frac{\Gamma_N}{\Gamma_0} \right)^2,$$

onde $\beta = 0.17$. Os resultados obtidos neste trabalho constituem os primeiros resultados numéricos quantitativos para a levitação disponíveis na literatura.

Vale ressaltar que este mesmo comportamento para a levitação dos estados estendidos foi encontrado também a partir da análise que fizemos com o número de Thouless: exatamente a mesma dependência com todas as escalas de energia e comprimento. Esta comparação com outra ferramenta comprova a validade e generalidade do método utilizado.

A dependência que observamos para a levitação com N (índice do nível de Landau), se for extrapolada para $\hbar \omega_c / \Gamma < 1$, implica em um Diagrama de Fases que permite transições diretas $\nu > 1 \rightarrow$ isolante, em concordância com observações experimentais [21-23].

A dependência que obtivemos da levitação (e portanto do diagrama de fases) com o perfil de potencial desordenado pode explicar divergências entre resultados experimentais na literatura. A consequência direta do resultado evidenciado na Figura 4.11 é que a forma do diagrama de fases vai depender de quão abrupto ou suave é o potencial de desordem na amostra considerada no experimento. Porém, em nenhum dos casos os estados estendidos da segunda banda têm levitação maior do que na primeira banda, conforme era previsto na conjectura inicial de levitação.

A questão que ainda está em aberto é a análise quantitativa no limite de campos magnéticos ainda inferiores ao que conseguimos atingir. Saber se o comportamento observado se mantém nesse limite, ou de que forma ele se modifica, é bastante importante. Desse modo, a extensão do problema tratado aqui para sistemas maiores seria interessante e é uma das propostas de continuação deste trabalho.

Parte II

Origem dos Estados Localizados

Capítulo 5

Imagens de Sistemas Hall Quânticos

Recentemente têm sido desenvolvidas algumas técnicas experimentais que possibilitam a obtenção de imagens de sistemas Hall quânticos, ajudando a desvendar sua natureza microscópica [65-68].

As imagens mais reveladoras disponíveis atualmente são obtidas através de duas diferentes técnicas: a primeira é a chamada SCA (*subsurface charge accumulation*) [68], onde a densidade do gás de elétrons é aumentada localmente sob uma ponta metálica (que atrai os elétrons). Dessa maneira, uma “bolha” de elétrons é formada sob esta ponta e, enquanto a ponta varre a superfície da amostra, esta “bolha” move-se dentro do sistema, experimentando diferentes potenciais eletrostáticos (potencial de desordem) locais. O processo de carga dessa “bolha” é regido pelo bloqueio Coulombiano, ou seja, tem-se uma espécie de quantum dot móvel. As medidas feitas nas diferentes regiões da amostra, do processo de carga desse dot móvel, fornecem um mapa do potencial eletrostático, assim como sentido pelos elétrons do gás de elétrons bidimensional. Um dos principais resultados destes experimentos é o fato de que, medidas em torno dos fatores de preenchimento $\nu = 1$ e de $\nu = 2$ mostram os mesmos contornos nos mesmos lugares, indicando que o mesmo potencial eletrostático está sendo observado nas diferentes fases do efeito Hall quântico.

Na segunda das técnicas mencionadas, um transistor de um único elétron é usado para varredura do potencial eletrostático [65-67]. Os autores conseguem resolver individualmente estados localizados e identificar eventos discretos no processo de carga desses estados, conforme a densidade eletrônica do sistema é alterada [65,66].

Neste Capítulo 5 será dado enfoque para esta segunda técnica de microscopia, mostrando-se e discutindo-se algumas das imagens obtidas. Veremos que essas novas imagens permitem um entendimento mais claro do processo de blindagem eletrônica e da origem dos estados localizados no regime Hall quântico. Tendo como motivação estes resultados experimentais, estabelecemos neste trabalho um modelo que descreve os estados localizados como regiões compressíveis (quantum dots ou antidots) imersas num plano incompressível. Considerando um regime dominado por interações Coulombianas e tratando a blindagem eletrônica na aproximação de Thomas-Fermi, resolvemos analiticamente a eletrostática de um quantum dot (ou antidot), como será discutido no Capítulo 6. No Capítulo 7, calculamos e discutimos as quantidades relevantes para a interpretação dos experimentos.

5.1 Microscopia com Transistor de Único Elétron: Técnica e Resultados

Existe uma variedade de técnicas que permitem explorar, em escala microscópica, as propriedades elétricas superficiais de materiais. Entre estas técnicas de microscopia podem ser citadas: *scanning capacitance microscopy*, *scanning Kelvin probe microscopy*, e *electric-field-sensitive atomic force microscopy* (EFM) (para referências sobre estas técnicas, ver referências citadas por [69]). Em 1997, Yoo e colaboradores [69] apresentaram uma nova técnica apresentando resolução para detecção de cargas muito maior que as técnicas anteriores, podendo

detectar variações correspondentes a até 1% da carga de um elétron. Esta técnica de microscopia (conhecida em inglês como *single electron transistor scanning electrometer*) utiliza como detector um transistor de elétron único fabricado na ponta de prova de um microscópio de varredura.

A Figura 5.1 mostra esquematicamente o transistor de único elétron servindo como ponta de prova para varredura do potencial eletrostático, suspenso sobre a superfície da amostra.

Qualquer variação no potencial eletrostático abaixo da ponta de prova gera uma modulação na corrente através do transistor de único elétron. Monitorando esta corrente através do transistor enquanto a ponta varre a superfície da amostra, podem ser construídas imagens que refletem o comportamento do potencial nas diferentes regiões da amostra. Desse modo, esta técnica permite que o potencial eletrostático seja medido com grande sensibilidade e resolução espacial sub-micrométrica. Maiores detalhes sobre esta técnica de microscopia utilizando o transistor de único elétron e sobre o processo de aquisição de imagens podem ser obtidos na referência [69].

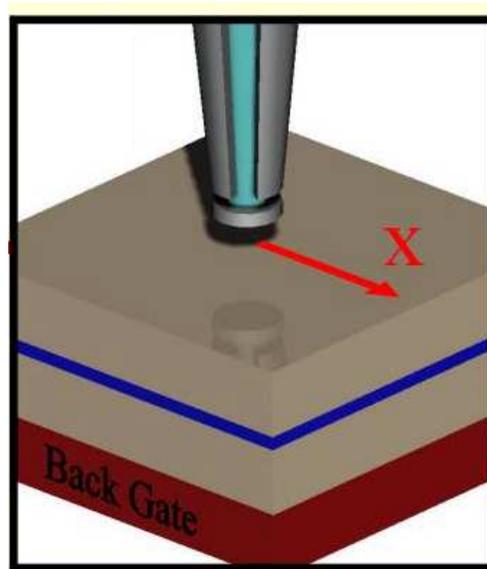


Figura 5.1: Esquema da ponta de microscopia, contendo o transistor de único elétron, suspenso sobre a amostra. A região azul representa o gás de elétrons bidimensional.

Em publicações recentes [65,66], um transistor de único elétron é usado para medidas locais do potencial eletrostático de sistemas Hall quânticos. Os autores foram capazes de obter imagens das variações do potencial em função da posição da ponta de prova ao longo da amostra, da densidade de portadores no gás de elétrons e do campo magnético. Os resultados, que serão discutidos aqui, constituem uma importante contribuição para o entendimento do efeito Hall quântico.

Um dos *scans* em função de densidade e posição (plano $n-x$) apresentados na referência [65] é reproduzido a seguir, na Figura 5.2. Para cada posição fixa da ponta de prova ao longo da linha varrida sobre a amostra (posição fixa no eixo x) a densidade de portadores no gás de elétrons é variada no intervalo mostrado (através da variação na voltagem no *back-gate*). A escala de cores indica as oscilações observadas no potencial sentido pela ponta de prova. Os picos, indicados pela cor mais escura, correspondem a alterações locais abruptas no potencial, ou seja, a eventos discretos de carga ocorrendo naquele local. Conforme a posição da ponta de prova percorre uma linha reta sobre a amostra (e para cada uma dessas posições tendo a densidade variada no mesmo intervalo), um padrão de linhas escuras é observado, linhas que se agrupam em regiões específicas da amostra. O comportamento desse conjunto de linhas escuras consecutivas agrupando-se em determinadas regiões é associado ao espectro de carga de dots e antidots. Ou seja, estão sendo observados elétrons sendo adicionados (ou retirados), um a um, a regiões confinadas que têm comportamento de dots (ou de antidots no caso dos portadores serem buracos). Essas regiões confinadas são os estados localizados. O comprimento em x das linhas escuras ao longo das quais o sinal é máximo, é interpretado como sendo a extensão espacial do estado localizado.

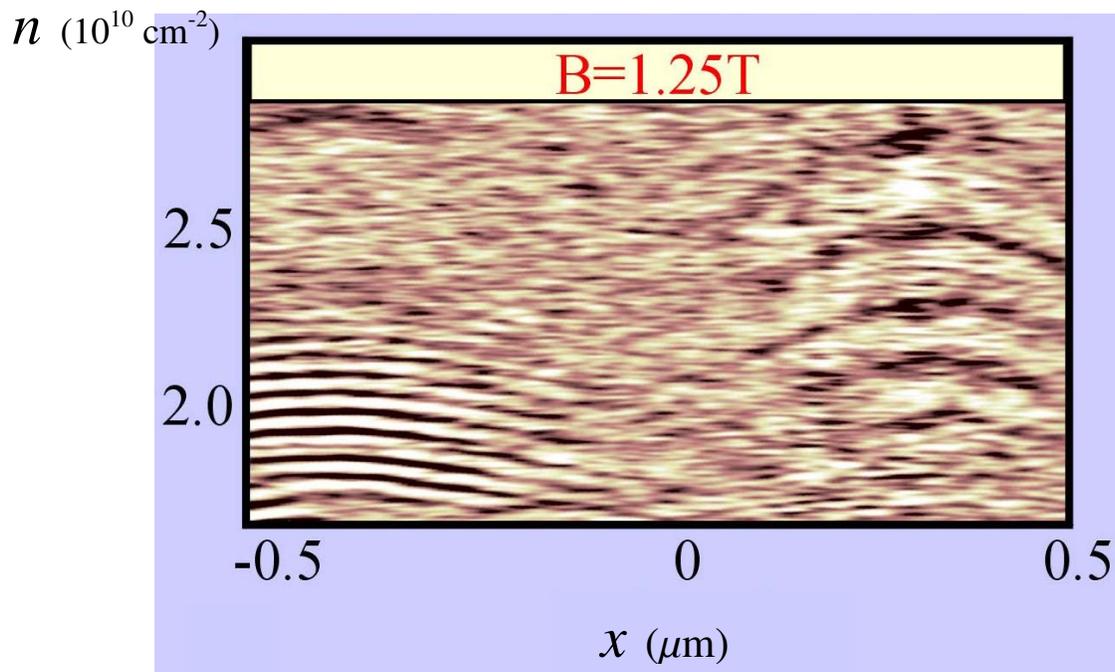


Figura 5.2: *Scan espacial, mostrando medidas de $\partial\mu/\partial V_{BG}$ em função da posição x , e da densidade n . Figura retirada da referência [65].*

Desse modo, através dos scans espaciais (plano n - x) utilizando esta microscopia com o transistor de único elétron, os autores da referência [65] são capazes de identificar estados localizados (regiões onde esses grupos de linhas se formam), sua posição na amostra e sua extensão espacial.

Em outra medida, ainda mais elaborada, os autores da referência [65] observam a evolução dessas linhas (espectro de carga dos estados localizados) não mais em função da posição, mas sim em função da variação do campo magnético. Eles mantêm a ponta de prova em uma posição fixa sobre a amostra, enquanto variam a intensidade do campo magnético aplicado e a densidade de portadores no gás de elétrons (variando a voltagem no *back gate*). Com isso eles obtêm um mapa do plano n - B , que revela um padrão de regiões contendo uma estrutura fina de linhas. Estas linhas evoluem paralelas à inclinação correspondente aos fatores de preenchimento inteiros e

fracionários ($\nu = 1/3, 1, 2, 3, 4$), como mostra a Figura 5.3A. Observa-se também um grupo de linhas horizontais associadas à fase isolante ($\nu = 0$). A observação dessas linhas constitui uma informação nova sobre esses sistemas, que não havia aparecido em nenhum tipo de medida anteriormente realizada e nem havia previsões indicando nesse sentido. Outra das interessantes observações feitas a partir dessa imagem é que os estados localizados formam grupos de largura Δn constante ao longo de B e, além disso, as linhas em torno dos diferentes fatores de preenchimento têm todos a mesma largura Δn .

Parte da imagem pode ser observada em maior detalhe na Figura 5.3B. As linhas que indicam o movimento de cargas nos estados localizados evoluem no plano com inclinação constante: exatamente a mesma inclinação do preenchimento Hall correspondente. Surpreendentemente, apesar da degenerescência dos níveis de Landau aumentar linearmente com o campo magnético, o número de estados localizados observados em cada grupo é fixo, não depende de B .

Os autores argumentam que estas observações, de linhas com inclinação constante e em número fixo independentemente de B , não podem ser explicadas pela teoria de partícula independente. No quadro descrito pela teoria de partícula única, os elétrons populam estados num potencial de desordem fixo, que não varia de acordo com o fator de preenchimento: o potencial visto pelos elétrons não é modificado pela blindagem eletrônica. Mas atualmente sabe-se que a habilidade dos elétrons para ajustar sua densidade ao potencial de desordem depende do fator de preenchimento [70-75]. Na próxima seção será discutido o modelo proposto pelos autores da referência [65] para explicar as observações feitas.

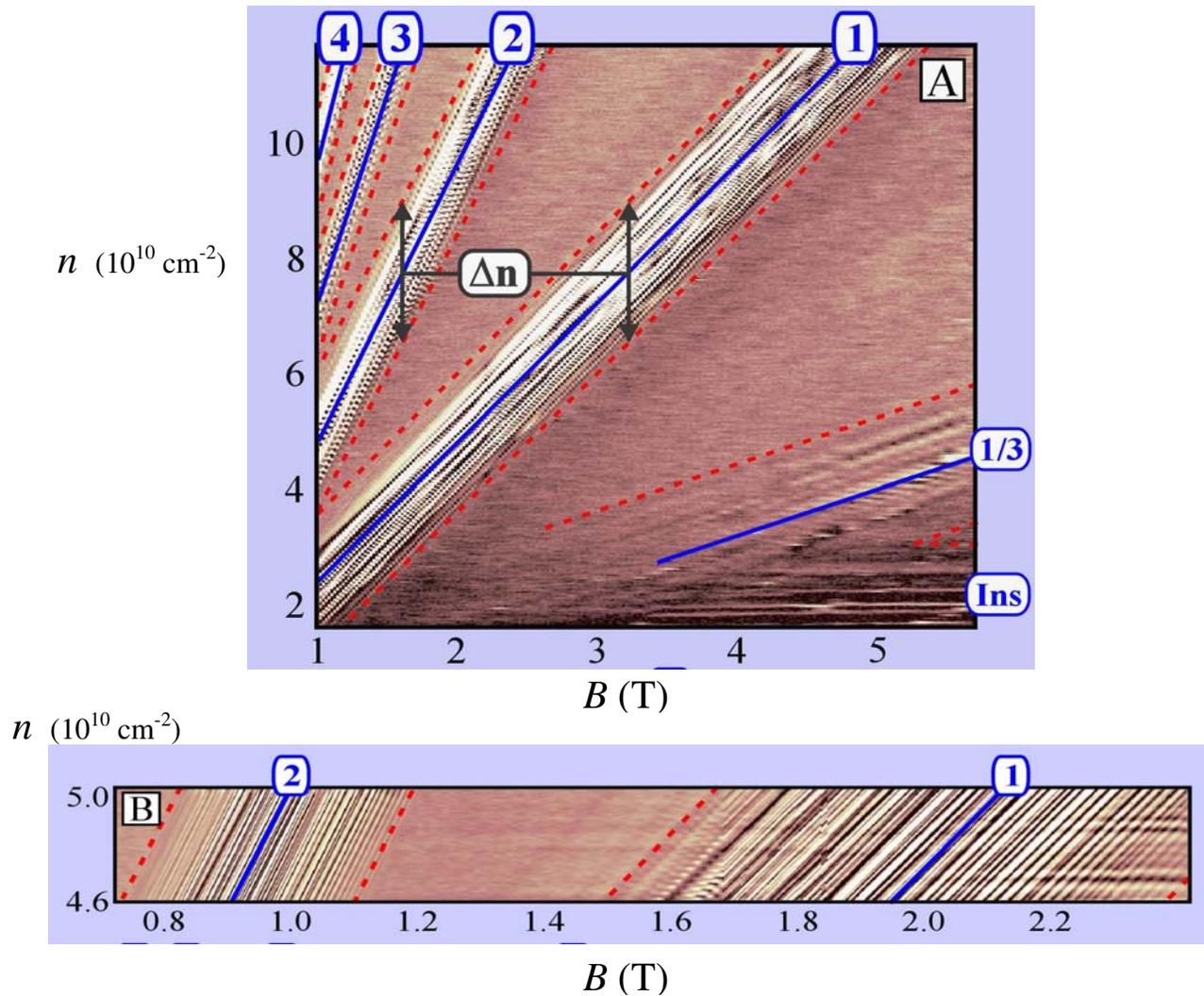


Figura 5.3: (A) Mapeamento do potencial eletrostático em função do campo magnético B e da densidade de portadores n , mostrando um padrão de regiões compressíveis (escuras) e incompressíveis (claras) no regime de Efeito Hall Quântico. Linhas bem definidas se agrupam em torno dos fatores de preenchimento inteiros e fracionários, em regiões de largura Δn constante. (B) Detalhe da rica estrutura de linhas em torno de $\nu = 1$ e $\nu = 2$, no plano n - B . Observa-se que dentro de cada grupo, as linhas estão em número constante ao longo de B e que todas as linhas apresentam exatamente a mesma inclinação. Figuras da referência [65].

5.2 Blindagem e Formação de Quantum Dots

Para explicar suas observações experimentais (discutidas na seção 5.1), S. Ilani e co-autores [65] discutem que é necessário ir além da aproximação de partícula independente e considerar os efeitos da interação elétron-elétron. A interação gera uma redistribuição da densidade eletrônica no gás de elétrons bidimensional, de modo a blindar o potencial de desordem. O quadro proposto para explicar estes resultados [65] será discutido a seguir.

Seguindo as idéias de trabalhos anteriores sobre blindagem no regime Hall quântico [70-75], discutem-se na referência [65] as limitações que os elétrons têm em sua habilidade de blindar o potencial de desordem quando o nível de Fermi está próximo de fatores de preenchimento inteiros. A idéia principal é que, para um dado potencial de desordem, existe uma modulação de densidade $n(r)$, que blindar perfeitamente a desordem, minimizando assim o potencial eletrostático resultante $\phi(r)$. Entretanto, nos extremos das bandas de Landau (longe do centro), pode ser impossível aos elétrons ajustar sua densidade em todas as regiões do gás bidimensional devido a limitações nos valores mínimo e máximo da densidade permitida, impostas pela presença de *gaps* entre níveis de Landau [70-75].

A Figura 5.4 abaixo (retirada da referência [65]) ilustra essa situação, comparando os ajustes da densidade eletrônica $n(x,y)$ e os respectivos potenciais eletrostáticos $\phi(x,y)$, para três diferentes fatores de preenchimento dentro do primeiro nível de Landau: (I) nível quase vazio, (II) meio-preenchimento, (III) nível quase cheio. As curvas foram obtidas usando cálculos autoconsistentes na aproximação de Thomas-Fermi [71] para um potencial típico de desordem. Em resposta ao potencial de desordem considerado, a modulação da densidade eletrônica requerida para uma blindagem perfeita tem amplitude $\Delta n_{disorder}$, como mostrado no caso (II). Nas regiões próximas ao meio-preenchimento, os elétrons adicionados a esse sistema experimentarão um potencial eletrostático perfeitamente plano e serão, portanto, completamente delocalizados.

Por causa do *gap* relativamente grande em energia entre os níveis de Landau, nos extremos de cada nível a densidade não pode ser menor que determinado valor n_{min} (zero para o primeiro nível) ou exceder um certo valor máximo n_{max} . Essa restrição no processo de blindagem é

ilustrada nas situações (I) e (III) da Figura 5.4, onde aparecem regiões em que a densidade $n(x,y)$ é limitada pelos valores máximo e mínimo permitidos (regiões incompressíveis), enquanto em outras regiões a modulação da densidade ainda é possível (regiões compressíveis).

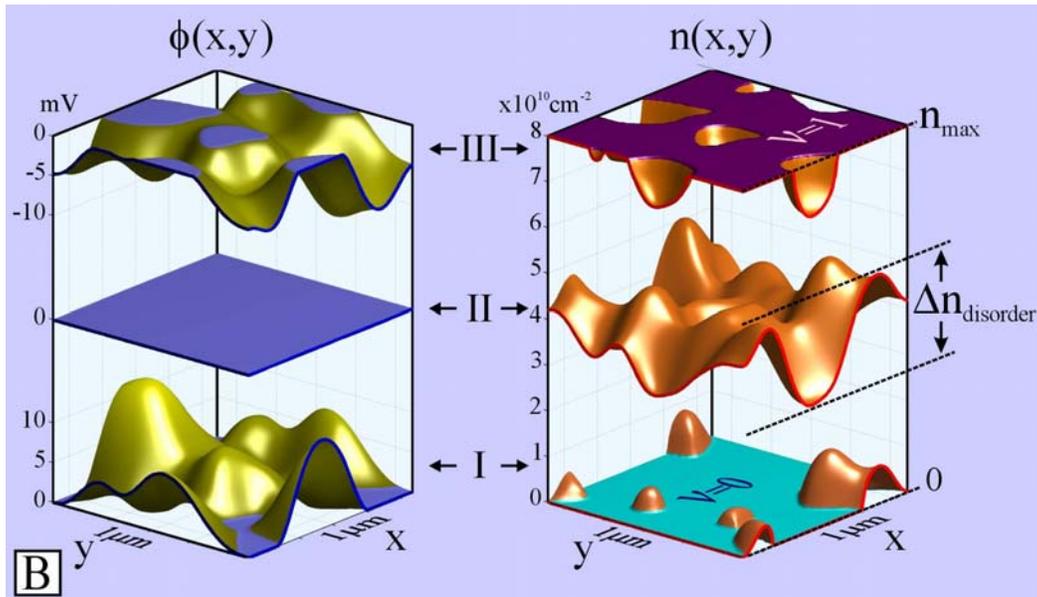


Figura 5.4: Modulação da densidade eletrônica $n(x,y)$ e o respectivo potencial eletrostático $\phi(x,y)$, calculado auto-consistentemente na aproximação Thomas-Fermi para um nível de Landau (I) quase vazio, (II) em meio-preenchimento, (III) quase cheio. Um potencial de desordem típico é considerado. Em resposta ao potencial de desordem considerado, a modulação de densidade requerida para uma blindagem perfeita tem amplitude $\Delta n_{\text{disorder}}$, como mostrado no caso (II). Elétrons adicionados ao sistema em torno do centro da banda (meio-preenchimento como no caso II) experimentam um potencial eletrostático constante e são completamente delocalizados. Por outro lado, perto dos extremos do nível, a densidade não pode se ajustar em todas as regiões e portanto áreas incompressíveis aparecem (denotadas por $\nu = 0$ ou $\nu = 1$). Acredita-se que as áreas compressíveis que restam, rodeadas de áreas incompressíveis, comportem-se como quantum dots (ou antidots). Figura retirada da referência [65].

O principal argumento apresentado na referência [65] para explicar as observações experimentais é que regiões compressíveis isoladas dessa maneira por regiões incompressíveis apresentariam comportamento de *quantum dots* (ou *antidots*). Isso significa que elétrons podem ser presos por esses *dots*, localizando-se nessas regiões, e que o mecanismo de carga será quantizado, ou seja, governado pelo regime de bloqueio Coulombiano (*Coulomb-blockade*). Esse mecanismo quantizado de carga seria o responsável pelas linhas quantizadas observadas experimentalmente, paralelas ao longo dos fatores de preenchimento inteiros (como vistas na Figura 5.3).

Exatamente ao longo das linhas no plano n - B definindo fator de preenchimento inteiro, o gás de eletros 2D é incompressível em toda sua extensão, e portanto o potencial de desordem não é blindado. A partir desses fatores inteiros, conforme a densidade é ligeiramente aumentada (diminuída), regiões que se comportam como dots (antidots) começam a ser formadas, onde elétrons são adicionados para variações discretas na densidade. Os autores [65] então argumentam que a formação dos *dots* depende apenas da forma do potencial que é fixo e que o mecanismo de carga desses *dots* depende apenas da eletrostática e não do campo magnético (o único efeito de B seria variar os valores de n_{\max} and n_{\min}). Portanto esse modelo implicaria num número constante de linhas de carga com a variação do campo magnético, paralelas aos fatores de preenchimento que definem o efeito Hall quântico, exatamente como observado experimentalmente.

Uma análise quantitativa e uma verificação se esse modelo realmente descreve os detalhes das medidas experimentais ainda está faltando e é um dos principais objetivos desse trabalho.

5.3 Primeiras Estimativas:

Tamanho dos Dots e Antidots

Analisando as imagens de sistemas Hall quânticos da referência [65], pode-se primeiramente fazer estimativas simples em relação ao tamanho dos *dots* e dos *antidots* em questão. Um dos vários *scans* de densidade em função de posição (plano $n-x$) mostrados na referência [65] foi reproduzido na Figura 5.2 mostrada anteriormente. Como foi dito, o comprimento em x das linhas escuras observadas é interpretado como sendo a extensão espacial do estado localizado.

Se assumirmos que sucessivas linhas escuras no plano $x-n$ da Figura 5.2 correspondem à adição de elétrons, um a um, ao *quantum dot* (ou buracos ao *antidot*), então podemos relacionar a separação entre sucessivas linhas neste plano (δn) com a área do *dot* (ou *antidot*). A densidade δn deve corresponder a:

$$\delta n = \frac{1 \text{ elétron}}{\text{área do dot}}.$$

De uma maneira geral e intuitiva, quanto menor o tamanho dos *dots* e *antidots*, maior deverá ser a separação em densidade entre uma linha e outra.

A partir dos dados da Figura 5.2 observamos que para o *quantum dot* (linhas no lado esquerdo da figura) a separação δn entre duas linhas consecutivas é de $\approx 5.7 \mu\text{m}^{-2}$. Usando a relação acima e considerando um *dot* circular, encontramos que a separação corresponde a:

diâmetro do *dot*: $d \approx 0.47 \mu\text{m}$.

Para o *antidot*, observamos que a separação entre linhas, δn , varia entre $14 \mu\text{m}^{-2}$ e $24 \mu\text{m}^{-2}$

(nesse caso a separação claramente não é constante). Esses valores correspondem a :

$$\text{diâmetro do } \textit{antidot}: 0.22 \mu\text{m} \leq d \leq 0.30 \mu\text{m}.$$

Esses diâmetros obtidos para o *dot* e para o *antidot* a partir da separação entre as linhas estão em boa concordância com o comprimento em x dos segmentos observados na Figura 5.2.

Capítulo 6

Abordagem Analítica

6.1 Teorias de Blindagem no Regime Hall Quântico

O fenômeno de blindagem é uma manifestação das interações elétron-elétron. Em um semicondutor dopado, a distribuição eletrônica será espacialmente não-homogênea em consequência de flutuações na concentração de impurezas carregadas. Em oposição ao potencial de impurezas, ocorre um rearranjo na densidade eletrônica, de forma que essa densidade produz seu próprio potencial, na tentativa de cancelar o potencial de impurezas, resultando em um potencial total constante. Esse é o mecanismo conhecido por blindagem eletrônica.

Na aproximação de Thomas-Fermi, o potencial blindado resultante $V_{scr}(\mathbf{r})$, para um sistema eletrônico bidimensional, é dado por:

$$V_{scr}(\mathbf{r}) = V_{imp}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int d^2r' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (6.1)$$

onde $V_{imp}(\mathbf{r})$ é o potencial de impurezas (de desordem) e $n(\mathbf{r})$ é a distribuição de densidade eletrônica. A aproximação de Thomas-Fermi é apropriada para um potencial de impurezas suave, que varie lentamente em comparação às escalas de comprimento envolvidas. Essa aproximação é válida no caso do problema a ser abordado aqui, pois para sistemas eletrônicos 2D típicos formados em semicondutores, as escalas de comprimento envolvidas excedem o raio de blindagem de Thomas-Fermi r_{TF} . Deve-se notar também que para $B = 0$, dentro dessa aproximação, uma distribuição não-uniforme de densidade $n(\mathbf{r})$ representaria um custo na energia cinética dos elétrons. Entretanto, para valores significativos de B não é necessário considerar a energia cinética enquanto o fator de preenchimento $\nu(\mathbf{r})$ permanecer em um mesmo nível de Landau.

Dois regimes de blindagem são considerados:

No regime de blindagem linear, os elétrons são capazes de ajustar sua densidade $n(\mathbf{r})$ de modo a produzir uma modulação para blindagem perfeita. Isso resulta em um potencial blindado constante: $V_{scr}(\mathbf{r}) = \mu$ (onde μ é o potencial químico).

No regime de blindagem não-linear, os elétrons falham em cancelar o potencial de impureza, não sendo capazes de se modularem com o $n(\mathbf{r})$ desejado para uma blindagem perfeita.

Diversos autores estudaram estes processos de blindagem no regime de efeito Hall quântico [70-75].

6.2 Blindagem Não-Linear e Solução da Eletrostática de um Quantum Dot

Nesta seção serão usadas teorias analíticas envolvendo blindagem não-linear no regime Hall quântico para estabelecerem-se comparações diretas com os resultados experimentais do artigo recente publicado por S. Ilani *et al.* [65].

Busca-se uma solução exata para o problema envolvendo blindagem em um sistema que consiste de um gás de elétrons bidimensional contendo um *quantum dot*. O problema é dividido em duas regiões, como mostrado na Figura 6.1: o gás de elétrons 2D sendo a região incompressível e uma região circular compressível que define o *quantum dot*. Usaremos aqui o mesmo tipo de desenvolvimento analítico proposto por Efros [70,72]. Um desenvolvimento similar ao que adotaremos aqui, (porém para outra geometria de problema e com interesse na investigação de outras quantidades físicas), é utilizado no paper de Deruelle *et al.* [73].

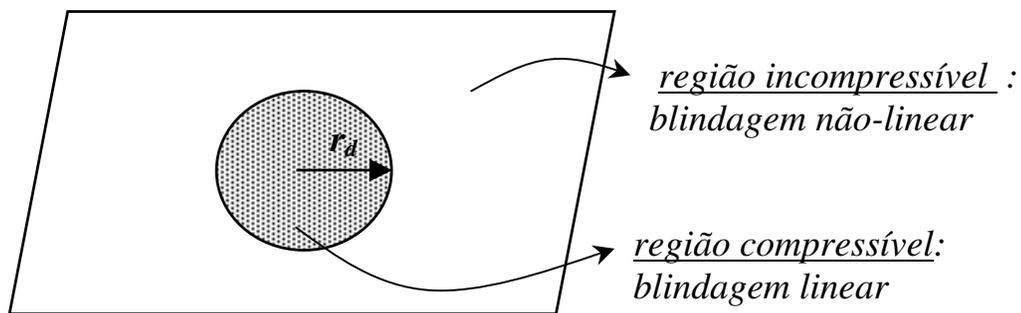


Figura 6.1: Esquema do quantum dot no gás de elétrons 2D. Nesse caso, a modulação de densidade será compressível apenas numa região circular – o dot – e incompressível em toda região restante. r_d é o raio do dot.

6.2.1 Três Passos para a Solução Exata

Será considerado, primeiramente, que o potencial de impureza $V_{imp}(r)$ que gera o *dot* é radialmente simétrico, podendo ser representado pela seguinte aproximação parabólica, na região em que $r \leq r_d$:

$$V_{imp}(r) = Kr^2, \quad \text{para } r \leq r_d. \quad (6.2)$$

Tem-se portanto o seguinte problema de eletrostática: encontrar o potencial eletrostático $\Phi(r, z)$ que obedeça a equação de Laplace no espaço 3D e que satisfaça as seguintes restrições e condições de contorno no plano do gás de elétrons bidimensional ($z = 0$):

$$-e\Phi(r, 0) = \mu - V_{imp}(r) \quad \text{para } r \leq r_d, \quad (6.3)$$

$$-e\Phi(r, 0) > \mu - V_{imp}(r) \quad \text{para } r > r_d, \quad (6.4)$$

$$-\left. \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right|_{z=0^+} + \left. \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right|_{z=0^-} = \frac{\sigma_{incomp}}{\epsilon \epsilon_0} = 0 \quad \text{para } r > r_d, \quad (6.5)$$

onde σ_{incomp} é a densidade eletrônica na região incompressível ($r > r_d$), a qual é constante e pode ser tomada como sendo zero (não há perda em generalidade na solução com esta escolha). Considerando que a profundidade d do gás de elétrons abaixo da superfície do semiconductor é pequena comparada ao raio do *dot*, isto é, que o *dot* está praticamente na superfície do semiconductor, então a constante dielétrica ϵ pode ser tomada como o valor médio das constantes dielétricas do ar e do semiconductor.

A solução para esse tipo de problema é discutida no livro de I. N. Sneddon [77] (“*Mixed boundary value problems in potential theory*”) e tem a seguinte forma:

$$\Phi(r, z) = \int_0^{\infty} dk A(k) J_0(kr) e^{-k|z|}, \quad (6.6)$$

onde

$$A(k) = \int_0^{r_d} f(t) \cos(kt) dt. \quad (6.7)$$

Para resolver este problema, três passos serão seguidos, cada um correspondendo à aplicação de uma das três condições listadas (Eqs. 6.3 a 6.5) a esta solução. Com isso, será possível determinar $\sigma_{comp}(r)$, a distribuição de densidade de carga na região compressível ($r < r_d$), que é dada por

$$\frac{\sigma_{comp}(r)}{\epsilon\epsilon_0} = -\left. \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right|_{z=0^+} + \left. \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right|_{z=0^-}, \quad \text{para } r \leq r_d. \quad (6.8)$$

Apresentamos aqui o desenvolvimento analítico utilizado, mostrando em detalhes as passagens entre as equações envolvidas. Por um lado isto torna esta seção um pouco densa, mas por outro lado, espera-se desta maneira contribuir para um melhor entendimento do trabalho feito e também que este registro possa servir como base de referência e auxílio para futuros trabalhos nessa mesma direção.

- **Primeiro passo:** Verificando se a terceira condição, Eq. (6.5), é satisfeita pela solução $\Phi(r, z)$.

Considerando a simetria em torno de $z = 0$ da função $e^{-k|z|}$, fica claro que: $\left. \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right|_{z=0^+} = -\left. \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right|_{z=0^-}$.

Então, para satisfazer a Eq. (6.5) é necessário, para $r > r_d$, que $\left. \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right|_{z=0^+} = 0$, isto é :

$$\left. \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right|_{z=0^+} = -\int_0^{\infty} kA(k)J_0(kr)dk = 0. \quad (6.9)$$

Uma relação que será útil, obtida por integração por partes, é

$$\begin{aligned}
 kA(k) &= \int_0^{r_d} f(t)k \cos(kt) dt \\
 &= \left(f(t)\sin(kt) \right) \Big|_{t=0}^{t=r_d} - \int_0^{r_d} \sin(kt) \frac{df(t)}{dt} dt \\
 &= f(r_d)\sin(kr_d) - \int_0^{r_d} \sin(kt) \frac{df(t)}{dt} dt .
 \end{aligned} \tag{6.10}$$

Substituindo esta relação para $kA(k)$ na Eq. (6.9), para $r > r_d$, tem-se

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right|_{z=0^+} &= -f(r_d) \int_0^{\infty} \sin(kr_d) J_0(kr) dk + \int_0^{\infty} \int_0^{r_d} \sin(kt) \frac{df}{dt} dt J_0(kr) dk \\
 &= -f(r_d) \underbrace{\int_0^{\infty} \sin(kr_d) J_0(kr) dk}_{0(r>r_d)} + \int_0^{r_d} dt \frac{df}{dt} \underbrace{\int_0^{\infty} \sin(kt) J_0(kr) dk}_{0(r>t)} = 0 ,
 \end{aligned} \tag{6.11}$$

onde foi usado (ver Gradshteyn 6ª edição, página 710):

$$\int_0^{\infty} \sin(kt) J_0(kr) dk = \begin{cases} 1/\sqrt{t^2 - r^2} & \text{if } 0 < r < t \\ 0 & \text{if } 0 < t < r \end{cases} . \tag{6.12}$$

Portanto, verifica-se assim que a solução para $\Phi(r,z)$, apresentada nas Eqs. (6.6) e (6.7), satisfaz a condição de contorno dada pela Eq (6.5).

- **Segundo Passo:** Verificando as implicações da imposição da segunda condição, Eq. (6.4), à $\Phi(r,z)$.

Impõe-se portanto que $-e\Phi(r,0) > \mu - V_{imp}(r)$, para $r > r_d$. Substituindo a expressão para $\Phi(r,z)$ (Eq. (6.6)) no caso $z = 0$, tem-se:

$$\begin{aligned}
 -e\Phi(r,0) &= -e \int_0^{\infty} dk A(k) J_0(kr) \\
 &= -e \int_0^{\infty} dk \int_0^{r_d} dt f(t) \cos(kt) J_0(kr) \\
 &= -e \int_0^{r_d} dt f(t) \int_0^{\infty} \cos(kt) J_0(kr) dk .
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

Usando (ver Gradshteyn 6ª edição página 710)

$$\int_0^{\infty} \cos(kt) J_0(kr) dk = \begin{cases} 1/\sqrt{r^2 - t^2} & \text{if } 0 < t < r \\ 0 & \text{if } 0 < r < t \end{cases} , \tag{6.14}$$

e considerando que no presente caso $r > t$ (porque $r > r_d$ e a integral em t varia no intervalo $0 < t < r_d$), então

$$-e\Phi(r,0) = -e \int_0^{r_d} dt f(t) \frac{1}{\sqrt{r^2 - t^2}} . \tag{6.15}$$

Portanto, para que a condição expressa pela Eq. (6.4) seja satisfeita, é necessário que:

$$\boxed{-e \int_0^{r_d} dt \frac{f(t)}{\sqrt{r^2 - t^2}} > \mu - V_{imp}(r) \text{ para } r > r_d .} \tag{6.16}$$

- **Terceiro Passo:** Definindo a função $f(t)$ de modo que o potencial $\Phi(r,z)$ satisfaça a primeira das condições (Eq. (6.3)).

A condição de contorno (6.3) impõe que $-e\Phi(r,0) = \mu - V_{imp}(r)$ em $r \leq r_d$. Como visto anteriormente, tem-se que

$$\begin{aligned} -e\Phi(r,0) &= -e \int_0^{\infty} dk A(k) J_0(kr) \\ &= -e \int_0^{r_d} dt f(t) \int_0^{\infty} \cos(kt) J_0(kr) dk. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Para esta integral agora, $0 < t < r_d$ e $r \leq r_d$. Assim, para usar a regra dada pela Eq. (6.14), é preciso dividir a integral sobre t em duas partes, $[0,r]$ e $[r,r_d]$, da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} -e\Phi(r,0) &= -e \int_0^r dt f(t) \underbrace{\int_0^{\infty} \cos(kt) J_0(kr) dk}_{1/\sqrt{r^2-t^2}} - e \int_r^{r_d} dt f(t) \underbrace{\int_0^{\infty} \cos(kt) J_0(kr) dk}_0 \\ &= -e \int_0^r dt \frac{f(t)}{\sqrt{r^2-t^2}}. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Então, através da comparação entre as Eqs. (6.3) e (6.18), vê-se que para satisfazer esta condição de contorno é necessário que

$$-e \int_0^r dt \frac{f(t)}{\sqrt{r^2-t^2}} = \mu - V_{imp}(r) \quad \text{em } r \leq r_d. \quad (6.19)$$

Esta equação integral tem a seguinte solução: (ver equações 2.3.7a e 2.3.7b em Sneddon [77])

$$\boxed{f(t) = \frac{2}{\pi e} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{r (V_{imp}(r) - \mu)}{\sqrt{t^2 - r^2}} dr} \quad (6.20)$$

Usando a aproximação parabólica para o potencial de desordem que define o *dot*, $V_{imp}(r) = Kr^2$ (ver Eq. (6.2)), válido para $r \leq r_d$, obtém-se

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{2}{\pi e} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{r(Kr^2 - \mu)}{\sqrt{t^2 - r^2}} dr \\ &= \frac{2}{\pi e} \frac{d}{dt} \left(K \underbrace{\int_0^t \frac{r^3}{\sqrt{t^2 - r^2}} dr}_{\frac{2t^3}{3}} - \mu \underbrace{\int_0^t \frac{r}{\sqrt{t^2 - r^2}} dr}_t \right). \end{aligned} \quad (6.21)$$

O que implica finalmente em

$$\boxed{f(t) = \frac{2}{\pi e} (2Kt^2 - \mu)}. \quad (6.22)$$

Portanto, seguindo os três passos detalhados acima, verificou-se que a Eq. (6.5) é satisfeita pela solução (6.6), definiu-se uma condição que precisa ser obedecida: Eq (6.16), e finalmente foi obtida uma expressão para a função $f(t)$, que aparece na solução do potencial eletrostático.

Agora pode-se obter a distribuição de densidade na região compressível, $\sigma_{comp}(r)$, usando a condição de continuidade dada pela Eq. (6.8)

$$\frac{\sigma_{comp}(r)}{\epsilon\epsilon_0} = -\left. \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right|_{z=0^+} + \left. \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right|_{z=0^-}, \quad \text{para } r \leq r_d.$$

Considerando que $\left. \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right|_{z=0^+} = -\left. \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right|_{z=0^-}$, tem-se: $\frac{\sigma_{comp}(r)}{\epsilon\epsilon_0} = -2 \left. \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right|_{z=0^+}$. Isto é:

$$\frac{\sigma_{comp}(r)}{\varepsilon\varepsilon_0} = 2 \int_0^{\infty} kA(k)J_0(kr)dk \quad . \quad (6.23)$$

Utilizando-se novamente a Eq. (6.10),

$$\frac{\sigma_{comp}(r)}{\varepsilon\varepsilon_0} = 2f(r_d) \underbrace{\int_0^{\infty} \sin(kr_d)J_0(kr)dk}_{\frac{1}{\sqrt{r_d^2-r^2}}} - 2 \int_0^{r_d} dt \frac{df}{dt} \int_0^{\infty} \sin(kt)J_0(kr)dk \quad . \quad (6.24)$$

Dividindo-se então a integral em t em duas partes: $[0,r]$ e $[r,r_d]$, e usando a regra dada pela Eq. (6.12),

$$\frac{\sigma_{comp}(r)}{\varepsilon\varepsilon_0} = \frac{2f(r_d)}{\sqrt{r_d^2-r^2}} - 2 \int_0^r dt \frac{df}{dt} \underbrace{\int_0^{\infty} \sin(kt)J_0(kr)dk}_0 - 2 \int_r^{r_d} dt \frac{df}{dt} \underbrace{\int_0^{\infty} \sin(kt)J_0(kr)dk}_{1/\sqrt{t^2-r^2}} \quad .$$

Assim,

$$\frac{\sigma_{comp}(r)}{\varepsilon\varepsilon_0} = \frac{2f(r_d)}{\sqrt{r_d^2-r^2}} - 2 \int_r^{r_d} \frac{df}{dt} \frac{1}{\sqrt{t^2-r^2}} dt \quad . \quad (6.25)$$

Se utilizarmos a expressão obtida na Eq. (6.22) para $f(t)$ para calcular df/dt e substituirmos o resultado na equação acima, então

$$\frac{\sigma_{comp}(r)}{\varepsilon\varepsilon_0} = \frac{2f(r_d)}{\sqrt{r_d^2-r^2}} - \frac{16K}{\pi e} \underbrace{\int_r^{r_d} \frac{t}{\sqrt{t^2-r^2}} dt}_{\sqrt{r_d^2-r^2}} \quad . \quad (6.26)$$

E, finalmente,

$$\sigma_{comp}(r) = \frac{2\varepsilon\varepsilon_0 f(r_d)}{\sqrt{r_d^2 - r^2}} - \frac{16K\varepsilon\varepsilon_0}{\pi e} \sqrt{r_d^2 - r^2}. \quad (6.27)$$

Analisando a Eq. (6.27) vê-se que se $f(r_d) > 0$, haverá uma divergência na distribuição de densidade $\sigma_{comp}(r) \rightarrow +\infty$ para $r \rightarrow r_d$. Entretanto, como as cargas envolvidas são elétrons, espera-se que $\sigma(r) \leq 0$. Por esta razão, devemos ter

$$f(r_d) \leq 0. \quad (6.28)$$

Uma expressão para $f(r_d)$ é obtida a partir da solução para $f(t)$ (Eq. (6.22)). Assim, para satisfazer a Eq. (6.28) é necessário que

$$f(r_d) = \frac{2}{\pi e} (2Kr_d^2 - \mu) \leq 0.$$

Ou seja,

$$\mu \geq 2Kr_d^2. \quad (6.29)$$

Examinando-se as implicações da condição (6.4), tem-se finalmente um único valor para $f(r_d)$. Conforme discutido no Apêndice A, a condição (6.4) não é satisfeita para $\mu > 2Kr_d^2$. Portanto, o único valor possível para o potencial químico μ que satisfaz ambas as condições (6.4) e (6.29) na região $r > r_d$ é

$$\mu = 2Kr_d^2, \quad (6.30)$$

o que implica $f(r_d) = 0$. Com isso a Eq. (6.27) torna-se, para $r \leq r_d$,

$$\sigma_{comp}(r) = -\frac{16K\varepsilon\varepsilon_0}{\pi e} \sqrt{r_d^2 - r^2}. \quad (6.31)$$

Um problema similar é também resolvido até esse ponto por Fogler, Levin e Shklovskii [78] e eles obtêm esta mesma densidade de distribuição de carga dentro do *quantum dot*. Na referência [79] a densidade de carga para um *quantum dot* também é obtida, mas para uma diferente escolha da forma do potencial de confinamento ($V_{imp}(r)$).

Calcula-se agora o potencial eletrostático para $z=0$:

- Na região do dot, ou seja, para $r \leq r_d$, tem-se (ver Eq. (6.3)):

$$-e\Phi(r,0) = \mu - V_{imp}(r) \quad .$$

Portanto, se na equação acima forem substituídas as expressões para μ obtida na Eq. (6.30) e para $V_{imp}(r)$ definida na Eq. (6.2), obtém-se

$$\boxed{-e\Phi(r,0) = K(2r_d^2 - r^2)} \quad (6.32)$$

- Para $r > r_d$, tem-se:

$$-e\Phi(r,0) = -e \int_0^\infty dk \int_0^{r_d} f(t) \cos(kt) J_0(kr) dt \quad .$$

Substituindo $f(t)$ e calculando as integrais:

$$\boxed{-e\Phi(r,0) = -\frac{2K}{\pi} \left[(r^2 - 2r_d^2) \text{ArcSin}\left(\frac{r_d}{r}\right) - r_d \sqrt{r^2 - r_d^2} \right]} \quad (6.33)$$

6.2.2 Quantização da Carga

Um outro fator a ser incluído no formalismo desenvolvido até aqui será considerar a quantização da carga contida no *dot* (na região compressível), em conexão com o fenômeno de bloqueio Coulombiano. A carga total Q na região compressível pode ser calculada de maneira simples integrando-se a densidade de carga nessa região:

$$Q = 2\pi \int_0^{r_d} r dr \sigma_{comp}(r) \quad (6.34)$$

Usando o resultado da Eq. (6.31), ou seja $\sigma_{comp}(r) = -\frac{16K \epsilon \epsilon_0}{\pi e} \sqrt{r_d^2 - r^2}$, chega-se a

$$Q = \frac{-32K \epsilon \epsilon_0}{e} \underbrace{\int_0^{r_d} r \sqrt{r_d^2 - r^2} dr}_{r_d^3/3}.$$

Assim,

$$Q = \frac{-32K \epsilon \epsilon_0}{3e} r_d^3. \quad (6.35)$$

Entretanto, a quantização de cargas implica que Q deve corresponder a um múltiplo inteiro de $-e$, onde e é o valor absoluto da carga do elétron.

$$Q = -Ne, \quad \text{onde } N = 1, 2, 3, \dots \quad (6.36)$$

Equacionando (6.35) e (6.36), vemos que a quantização de cargas implica em um raio quantizado para o *dot*, em função do número N de elétrons contidos no dot:

$$\boxed{r_d = \alpha N^{1/3}}, \quad (6.37)$$

onde a constante α (com dimensão de comprimento) é dada por

$$\alpha \equiv \left(\frac{3e^2}{32K \varepsilon \varepsilon_0} \right)^{1/3}. \quad (6.38)$$

Vê-se então que, de acordo com a Eq. (6.37), o raio do *dot* (r_d) cresce em quantidades discretas à medida que cada elétron é adicionado ao *dot*. Portanto espera-se observar nos experimentos o raio do *dot* se alargando com o aumento da densidade.

Substituindo este raio quantizado na Eq. (6.31), obtêm-se os seguinte valores discretizados para a densidade de carga na região compressível, $\sigma_{comp}(r)$:

$$\sigma_{comp}(r) = -\frac{16K \varepsilon \varepsilon_0}{\pi e} \left(\alpha^2 N^{2/3} - r^2 \right)^{1/2}, \quad (6.39)$$

Na Figura 6.2 a densidade $\sigma_{comp}(r)$ é graficada em função de r para $N = 1$, $N = 2$ e $N = 3$ elétrons.

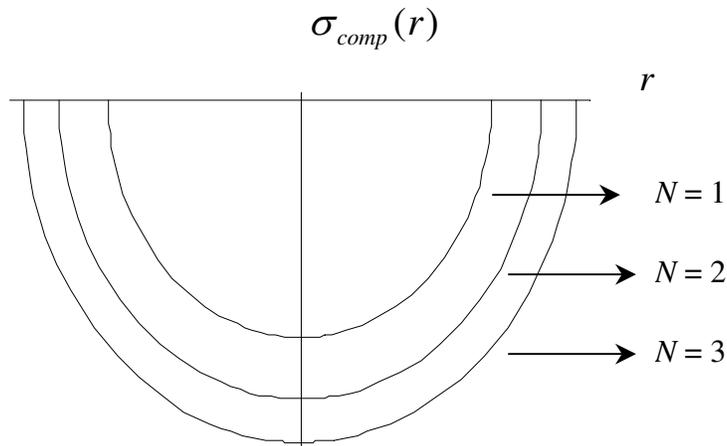


Figura 6.2: Densidade Eletrônica na região compressível, $\sigma_{comp}(r)$, em função de r , variando o número N de elétrons. Vê-se que quanto maior N , maior o raio do *dot* r_d .

Outra quantidade de interesse a ser calculada é a diferença em densidade $\delta\sigma_N(r)$ entre um *dot* com N elétrons e um *dot* com $N+1$ elétrons: $\delta\sigma_N(r) = \sigma_{comp(N)}(r) - \sigma_{comp(N+1)}(r)$.

Para r menor que o raio do dot de N menor, isto é, para $r < \alpha N^{1/3}$, esta diferença é dada por

$$\begin{aligned} \delta\sigma_N(r) &= \sigma_{comp(N)}(r) - \sigma_{comp(N+1)}(r) \\ &= -\frac{16K\varepsilon\varepsilon_0}{\pi e} (\alpha^2 N^{2/3} - r^2)^{1/2} + \frac{16K\varepsilon\varepsilon_0}{\pi e} (\alpha^2 (N+1)^{2/3} - r^2)^{1/2}. \end{aligned} \quad (6.40)$$

Para valores de r entre os raios das duas regiões, ou seja, $\alpha N^{1/3} < r \leq \alpha(N+1)^{1/3}$, onde $\sigma_{comp(N+1)} \neq 0$ mas $\sigma_{comp(N)} = 0$, a diferença é dada por

$$\begin{aligned} \delta\sigma_N(r) &= 0 - \sigma_{comp(N+1)}(r) \\ &= \frac{16K\varepsilon\varepsilon_0}{\pi e} (\alpha^2 (N+1)^{2/3} - r^2)^{1/2}. \end{aligned} \quad (6.41)$$

A Figura 6.3 a seguir mostra o gráfico de $\delta\sigma_N(r)$ em função de r para diferentes valores de N .

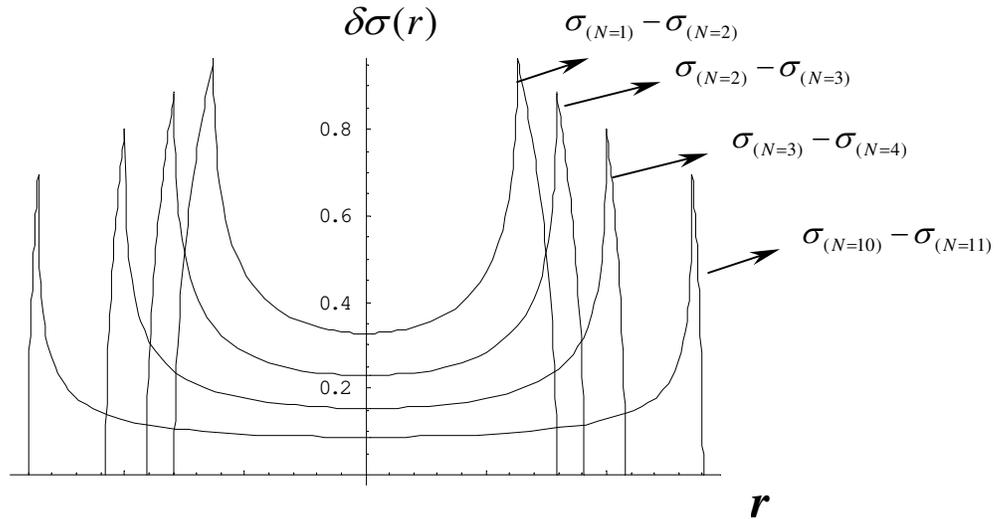


Figura 6.3: Diferença em densidade $\delta\sigma_N(r)$ entre dois níveis consecutivos (N and $N+1$), em função da posição r .

Vê-se a partir da Figura 6.3 que a diferença em densidade de N para $N+1$ é maior do que a diferença de $N+1$ para $N+2$ e assim sucessivamente. Pode-se ver também que esta diferença depende da posição em relação ao *dot*, sendo mais importante nas bordas do que no centro do *dot*.

Capítulo 7

Potencial Eletrostático

7.1 Potencial Eletrostático Tridimensional ($\Phi(r, z)$)

Até aqui, calculou-se o potencial eletrostático apenas no plano do gás de elétrons bidimensional, $\Phi(r, z = 0)$ (ver Eqs.(6.32) e (6.33)). Porém, nos experimentos [65,66] a ponta de prova que detecta variações no potencial eletrostático mantém uma certa distância (da ordem de poucas centenas de nanômetros) em relação ao gás de elétrons. Portanto, o interesse maior da abordagem analítica que desenvolvemos é obter uma expressão para $\Phi(r, z)$ válida para qualquer altura z e não apenas para $z = 0$.

No capítulo anterior demonstrou-se que a seguinte solução para $\Phi(r, z)$ (Eqs. (6.6) e (6.7)) satisfaz todas as condições que definem o nosso problema:

$$\Phi(r, z) = \int_0^{\infty} dk A(k) J_0(kr) e^{-k|z|},$$

onde

$$A(k) = \int_0^{r_d} f(t) \cos(kt) dt.$$

A partir das soluções obtidas para $f(t)$ e μ , Eqs. (6.22) e (6.30) respectivamente, tem-se que $f(t) = \frac{4K}{\pi e}(t^2 - r_d^2)$. Assim, substituindo-se esta expressão para $f(t)$ na solução para o potencial acima, chega-se a

$$\begin{aligned}\Phi(r, z) &= \int_0^\infty dk J_0(kr) e^{-k|z|} \int_0^{r_d} \frac{4K}{\pi e} (t^2 - r_d^2) \cos(kt) dt \\ &= \frac{4K}{\pi e} \int_0^{r_d} dt (t^2 - r_d^2) \int_0^\infty e^{-k|z|} \cos(kt) J_0(kr) dk .\end{aligned}\quad (7.1)$$

Pode-se agora usar a quantização do raio do dot obtida na Eq. (6.37): $r_d = \alpha N^{1/3}$, e assim escrever a expressão para o potencial eletrostático em função do número de elétrons dentro da região compressível:

$$\Phi_N(r, z) = \frac{4K}{\pi e} \int_0^{\alpha N^{1/3}} dt (t^2 - \alpha^2 N^{2/3}) \int_0^\infty e^{-k|z|} \cos(kt) J_0(kr) dk . \quad (7.2)$$

A integral em k na equação acima possui a seguinte solução analítica (ver Gradshteyn 6ª edição, eq. 6.751 – 3.10):

$$\int_0^\infty e^{-bx} \cos(ax) J_0(cx) dx = \frac{\left[\sqrt{(b^2 + c^2 - a^2)^2 + 4a^2 b^2} + b^2 + c^2 - a^2 \right]^{1/2}}{\sqrt{2} \sqrt{(b^2 + c^2 - a^2)^2 + 4a^2 b^2}} . \quad (7.3)$$

Usando este resultado, tem-se

$$\Phi_N(r, z) = -\frac{4K}{\pi e} \int_0^{\alpha N^{1/3}} (\alpha^2 N^{2/3} - t^2) \frac{\left[\sqrt{(z^2 + r^2 - t^2)^2 + 4t^2 z^2} + z^2 + r^2 - t^2 \right]^{1/2}}{\sqrt{2} \sqrt{(z^2 + r^2 - t^2)^2 + 4t^2 z^2}} dt . \quad (7.4)$$

Procedemos então com a seguinte transformação de variáveis:

$$\zeta \equiv \frac{z}{\alpha}; \quad \rho \equiv \frac{r}{\alpha}; \quad \tau \equiv \frac{t}{\alpha} . \quad (7.5)$$

Observe-se que α tem dimensão de comprimento, portanto, ζ e ρ são variáveis adimensionais. Após essa transformação de variáveis, o potencial passa a ser dado por

$$\Phi_N(\alpha\rho, \alpha\zeta) = -\frac{4K\alpha^2}{\pi e} \int_0^{N^{1/3}} (N^{2/3} - \tau^2) \frac{\left[\sqrt{(\zeta^2 + \rho^2 - \tau^2)^2 + 4\tau^2\zeta^2} + \zeta^2 + \rho^2 - \tau^2 \right]^{1/2}}{\sqrt{2}\sqrt{(\zeta^2 + \rho^2 - \tau^2)^2 + 4\tau^2\zeta^2}} d\tau . \quad (7.6)$$

E finalmente, se K for reescrito em função de α (invertendo a que define α : $K = \frac{3e^2}{32\epsilon\epsilon_0\alpha^3}$),

obtém-se

$$\Phi_N(\alpha\rho, \alpha\zeta) = \frac{-e}{4\pi\epsilon\epsilon_0\alpha} F_N(\rho, \zeta) , \quad (7.7)$$

onde

$$F_N(\rho, \zeta) = \frac{3}{2} \int_0^{N^{1/3}} (N^{2/3} - \tau^2) \frac{\left[\sqrt{(\zeta^2 + \rho^2 - \tau^2)^2 + 4\tau^2\zeta^2} + \zeta^2 + \rho^2 - \tau^2 \right]^{1/2}}{\sqrt{2}\sqrt{(\zeta^2 + \rho^2 - \tau^2)^2 + 4\tau^2\zeta^2}} d\tau . \quad (7.8)$$

F_N é uma função adimensional que contém toda a dependência do potencial eletrostático com r , z (ρ , ζ) e N . A integral em τ não tem solução analítica, mas pode ser resolvida numericamente. Para isso, usamos o programa *Mathematica*, produzindo os gráficos tridimensionais da função $F_N(\rho, \zeta)$ para diferentes valores de N . A Figura 7.1 mostra três desses gráficos, para $N = 1$ (superfície mais abaixo), $N = 2$ e $N = 3$ (acima) elétrons no dot. Lembre-se

que o centro do *dot* é em $\rho=0$, $\zeta=0$.

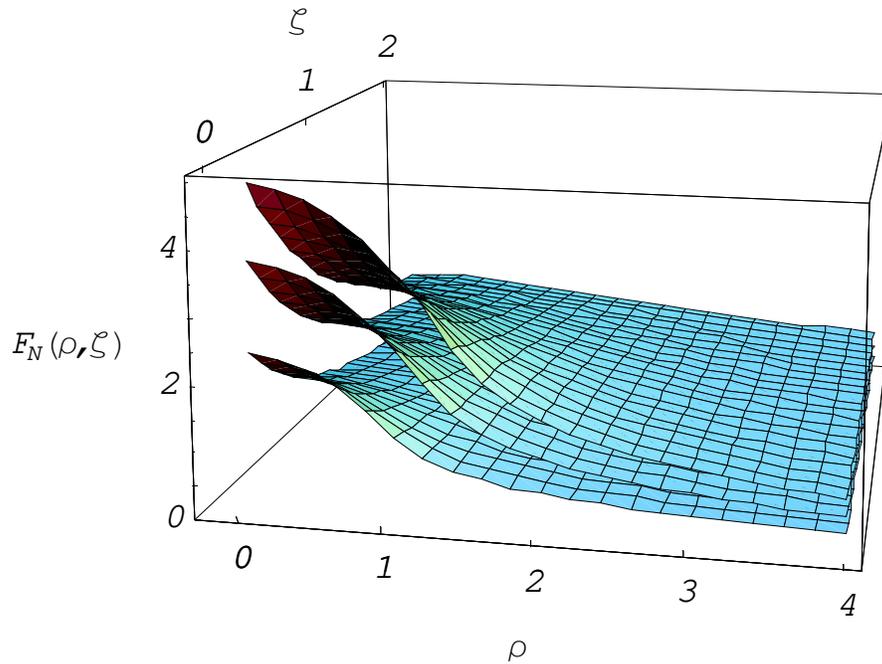


Figura 7.1: Potencial eletrostático (que, a menos de uma constante multiplicativa, corresponde a $F_N(\rho, \zeta)$), em função de ρ (raio do dot parametrizado) e ζ (altura em relação ao plano do dot, parametrizada). Aparecem superpostas as superfícies correspondendo às soluções para $N = 1$ elétron no dot (mais abaixo), $N = 2$ elétrons, e $N = 3$ elétrons (mais acima).

Na Figura 7.2 a seguir, são mostradas algumas seções transversais do gráfico acima. A função F_N é observada agora para valores fixos da altura em relação ao dot: $\zeta = 0$, $\zeta = 0.2$, $\zeta = 0.5$ e $\zeta = 1$. Todas as curvas são para $N = 1$.

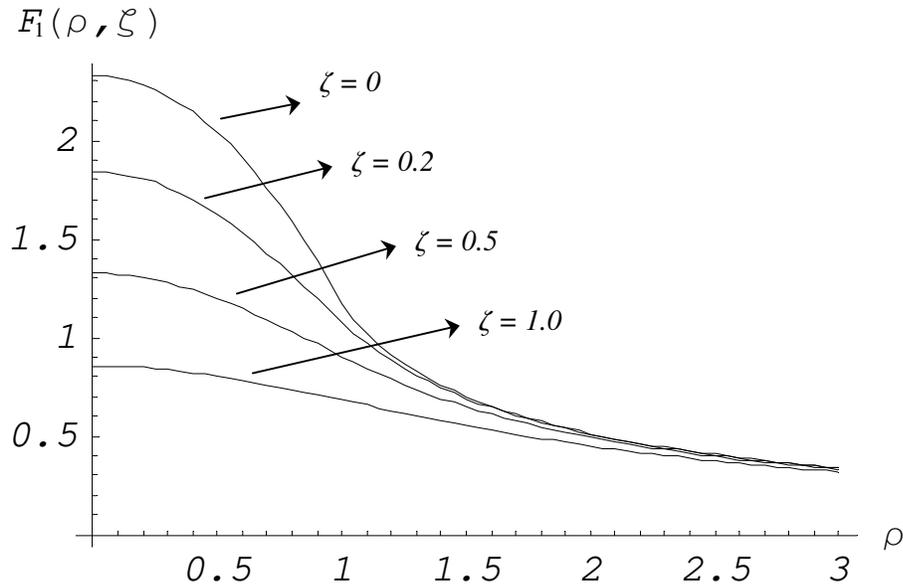


Figura 7.2: Comportamento de F em função de ρ , comparado para diferentes alturas (ζ) em relação ao dot. Todas as curvas são para o caso $N = 1$.

O gráfico da Figura 7.2 mostra como o potencial eletrostático devido ao dot torna-se mais fraco, suavizado, conforme a distância ao dot aumenta. A curva para $\zeta = 0$ ($z = 0$) corresponde ao potencial no plano do dot. Para $N = 1$, o valor de ζ exprime a razão entre a altura z e o raio do dot, pois $\zeta = z/\alpha$ e $r_d = \alpha N^{1/3}$, portanto $\zeta = N^{1/3} \frac{z}{r_d}$. Desse modo, a curva mais suave (a mais abaixo, onde $\zeta = 1$) corresponde a uma distância z acima do plano do gás de elétrons igual ao raio do dot contendo um elétron.

Nos experimentos a altura z é mantida fixa, correspondendo à altura da ponta de prova em relação ao gás de elétrons. Na Figura 7.3, são mostrados dois gráficos do potencial F_N em função de ρ para dois valores fixos de ζ ($\zeta = 0$ e $\zeta = 0.5$), cada um deles para diversos valores de N (número de elétrons na região compressível).

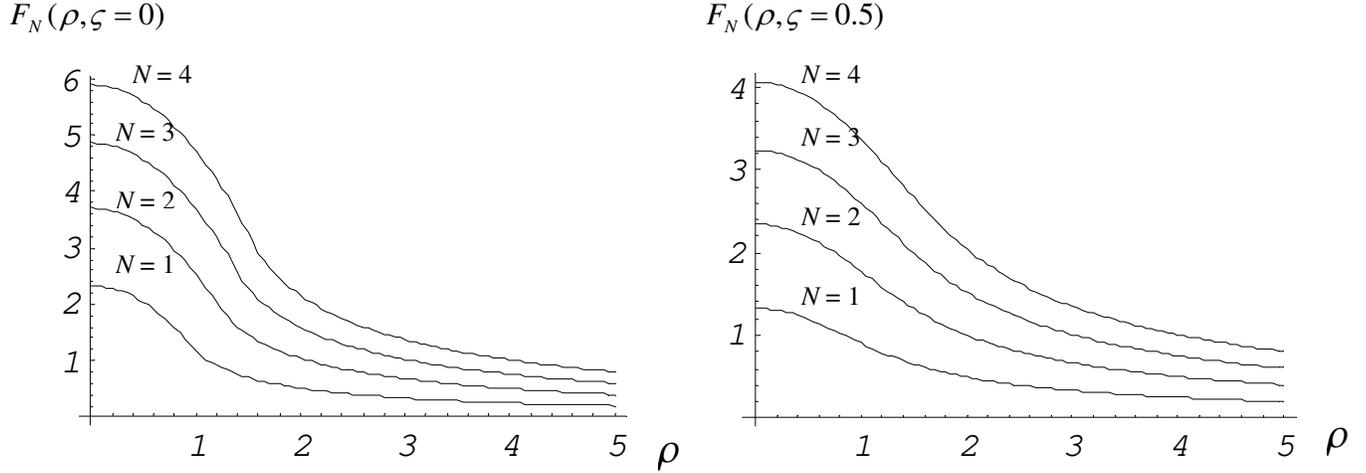


Figura 7.3: F_N em função de ρ , para distâncias fixas sobre o dot: no gráfico à esquerda, $\zeta=0$, enquanto no gráfico à direita, $\zeta=0.5$. Diferentes curvas correspondem a diferentes números de elétrons no dot, conforme indicado. Note-se que a escala no eixo y não é a mesma nos dois gráficos (a amplitude do potencial é menor conforme ζ aumenta).

Longe do dot, no limite assintótico onde a distância da ponta de prova ao dot é muito grande comparada ao raio do dot, isto é, $r^2 + z^2 \gg r_d^2 = N^{2/3} \alpha^2$, a integral que aparece na definição do potencial pode ser analiticamente resolvida. Nesse limite, que é equivalente a $\rho^2 + \zeta^2 \gg N^{2/3}$, vê-se facilmente pelas Eqs.(7.7) e (7.8) que o potencial eletrostático reduz-se a

$$\Phi_N(\alpha\rho, \alpha\zeta) = \frac{-Ne}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{r^2 + z^2}}, \quad (7.9)$$

exatamente como esperado, uma vez que este é o potencial, a uma distância $r^2 + z^2$, para uma carga pontual com carga Ne .

7.2 Variações Discretas no Potencial

Pelas curvas obtidas para o potencial eletrostático, vemos que conforme o número de elétrons for alterado discretamente no dot, o potencial eletrostático irá sofrer saltos, variando em degraus. O tamanho do salto em potencial, $\Delta\Phi_N$, quando o número de elétrons no dot muda de N para $N+1$ é dado por

$$\begin{aligned}\Delta\Phi_N(\alpha\rho, \alpha\zeta) &= \Phi_{N+1} - \Phi_N \\ &= \frac{-e}{4\pi\epsilon\epsilon_0\alpha} \Delta F_N(\rho, \zeta).\end{aligned}\quad (7.10)$$

onde $\Delta F_N = F_{N+1} - F_N$. A Figura 7.4 a seguir mostra $\Delta F_1(\rho, \zeta)$, correspondendo à diferença de potencial $F_2(\rho, \zeta) - F_1(\rho, \zeta)$.

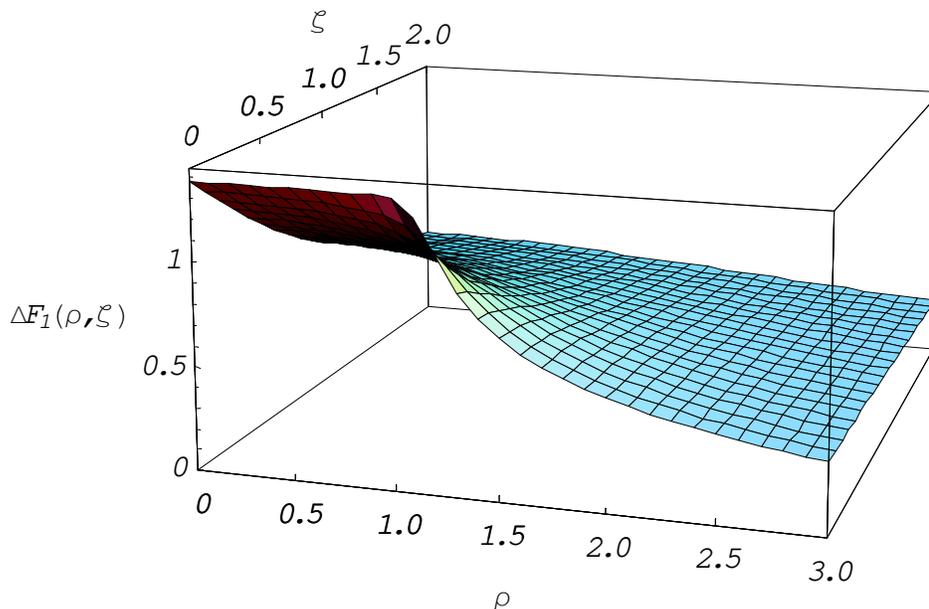


Figura 7.4: Variação no potencial eletrostático (proporcional a $\Delta F_1(\rho, \zeta)$) em função de ρ e ζ . A diferença em potencial aqui graficada é para $N=1$, ou seja, a diferença entre o potencial com $N=1$ e com $N=2$ elétrons.

No gráfico a seguir (Figura 7.5) são mostrados os $\Delta F_N(\rho, \zeta)$ para $N=1$, $N=2$ e $N=3$. O tamanho do salto em potencial ΔF_N diminui conforme o número de elétrons no dot aumenta, tendendo a zero para $N \gg 1$.

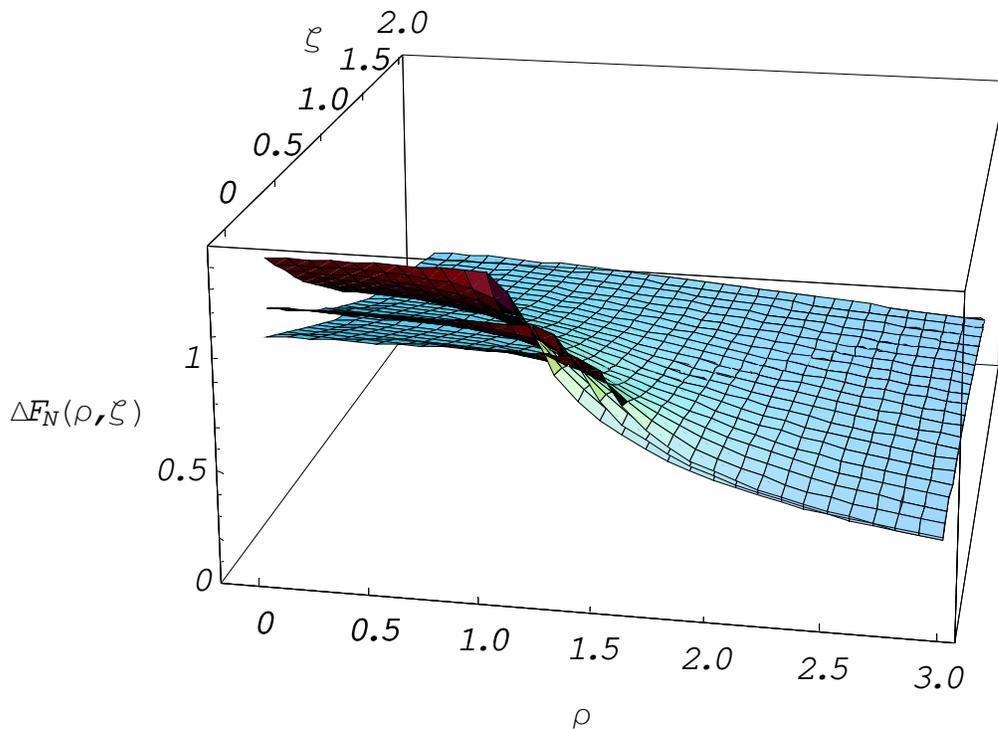


Figura 7.5: Variação no potencial eletrostático (proporcional a $\Delta F_N(\rho, \zeta)$) em função de ρ e ζ , para os casos $N=1$ (superfície mais alta), $N=2$ e $N=3$ (superfície inferior).

Um exame mais detalhado destas curvas $\Delta F_N(\rho, \zeta)$ é feito a seguir, analisando-se nas próximas figuras o comportamento para diferentes valores de ζ e N .

A Figura 7.6 mostra ΔF_1 em função de ρ , para cinco diferentes alturas fixas (ζ fixo). Em todas as curvas, foi tomado $N=1$. Vê-se que aumentado a distância de observação do potencial eletrostático (o que é equivalente a aumentar ζ com α fixo), os saltos em potencial tornam-se menores e a forma da curva em função de ρ é suavizada.

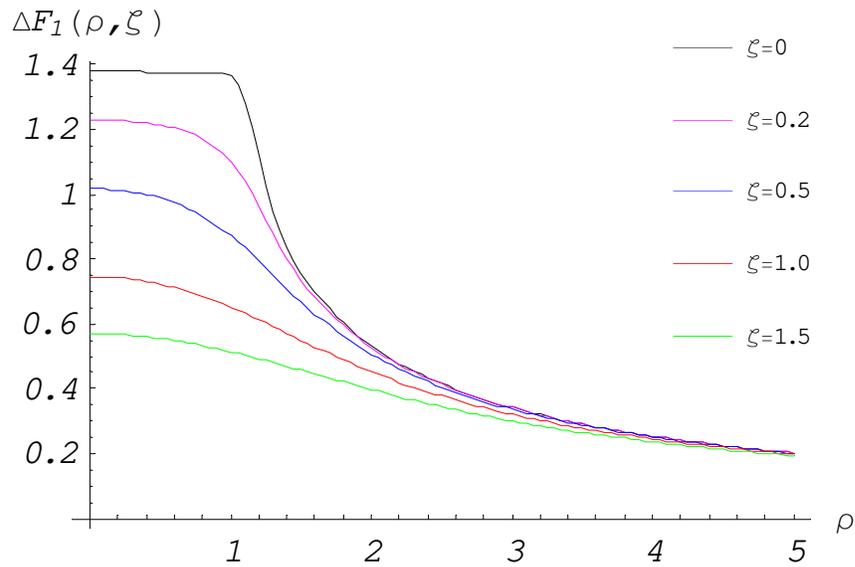


Figura 7.6: Comparação entre as variações no potencial eletrostático em função de ρ a partir de cinco diferentes alturas de observação. Todas as curvas correspondem a $N=1$.

A Figura 7.7 mostra a evolução dos saltos em potencial para diferentes N considerados. Cada gráfico corresponde a uma altura diferente ($\zeta = 0$ e $\zeta = 0.5$). As transições podem ser observadas aqui com mais clareza do que na Figura 7.5 mostrada anteriormente.

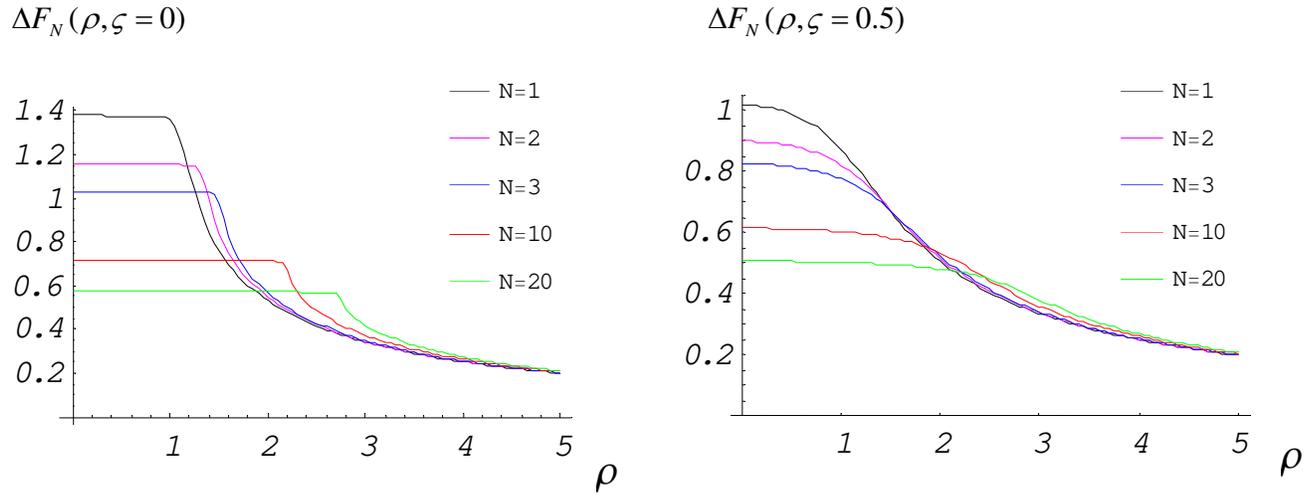


Figura 7.7: *Variação no potencial eletrostático (proporcional a ΔF_N) em função de ρ . O primeiro gráfico (à esquerda) corresponde a saltos no potencial medidos a $z=0$ ($\zeta=0$), ou seja no plano do gás de elétrons. uma altura fixa acima do plano do gás de elétrons. No gráfico à direita, uma altura correspondente a $\zeta=0.5$ é considerada. As diferentes curvas correspondem a diferentes valores de N .*

Conclusões da Parte II

Experimentos recentes de microscopia em sistemas Hall quânticos [65,66] conseguiram resolver individualmente estados localizados e identificar eventos discretos no processo de carga desses estados, conforme a densidade eletrônica do sistema é alterada. Para fatores de preenchimento correspondendo a platôs do efeito Hall quântico inteiro, os eventos de carga observados são atribuídos à adição ou remoção de um único elétron aos estados localizados [65]. Na região dos platôs fracionários, por outro lado, as oscilações observadas na carga dos estados localizados evidenciam que estas cargas correspondem a *quase-partículas* de carga fracionária [66]. Trata-se de uma observação experimental bastante direta dessas quase-partículas, que são centrais para a teoria do Efeito Hall quântico fracionário proposta por Laughlin [3].

A modulação espacial da densidade eletrônica nesses sistemas é decorrência das interações elétron-elétron e do processo de blindagem do potencial de desordem. Diversos autores [70-75] discutiram o processo de blindagem eletrônica em sistemas Hall quânticos, mostrando que este processo varia fortemente de acordo com a posição do nível de Fermi em relação ao nível de Landau. Essencialmente, quando o nível de Fermi está próximo ao centro da banda, os elétrons podem ajustar a sua densidade para uma blindagem perfeita (blindagem linear), mas nos extremos das bandas, a habilidade dos elétrons para blindagem é limitada (blindagem não-linear).

Utilizando a teoria de blindagem não-linear proposta por Efros [70,72,76], na aproximação de Thomas-Fermi, consideramos um modelo que descreve um estado localizado como sendo uma região compressível (quantum dot ou antidot) cercada por uma região incompressível onde o fator de preenchimento é inteiro. Consideramos que a carga total no dot é um múltiplo inteiro da carga eletrônica (quantização da carga). Porém, o mesmo modelo pode ser usado para tratar

estados localizados observados nos platôs do efeito Hall quântico fracionário, simplesmente assumindo que quase-partículas de carga fracionária substituem a carga eletrônica. O cálculo que fizemos das propriedades eletrostáticas deste dot é inédito e fornece uma ferramenta útil para comparações com os experimentos.

Uma primeira análise feita diz respeito à dependência do raio do quantum dot r_d com o número de elétrons N do dot. O resultado obtido (Eq (6.37)) indica que o raio do dot aumenta à medida que cada elétron é adicionado, seguindo a dependência $r_d \propto \sqrt[3]{N}$. Apesar de não ser possível definir com precisão esse comportamento nas imagens disponíveis (scans espaciais), acreditamos que futuras medidas deverão evidenciar o aumento previsto do raio do dot com a densidade. Vale notar que nossos cálculos também podem ser aplicados para o caso de antidots, considerando N o número de buracos no antidot. A diferença é que agora, buracos são adicionados aos antidots conforme a densidade é reduzida. Assim, enquanto os dots devem se alargar com o aumento de densidade, os antidots devem se alargar com a redução de densidade eletrônica.

O principal resultado obtido é o cálculo do potencial eletrostático nas vizinhanças do dot, que fornece uma estimativa do tamanho dos saltos que ocorrem no potencial ($\Delta\Phi$) à medida que cada elétron é adicionado ou removido do dot.

Conforme discutido em mais detalhes no Capítulo 5, a escala de cores das imagens de microscopia que analisamos [65,66] corresponde a medidas de compressibilidade [80], sensíveis a variações discretas no potencial eletrostático. As regiões mais escuras correspondem a picos no sinal detectado pela ponta de prova. Uma medida deste sinal (que dará origem à escala de cores) em função da densidade é mostrado na referência mais recente do grupo, artigo publicado na Science [66] (ver reprodução do gráfico abaixo, na Figura 8.1). Estas medidas foram realizadas com a ponta de prova em posição fixa sobre o centro de um dos antidots observados. As oscilações correspondem a saltos abruptos no potencial eletrostático.

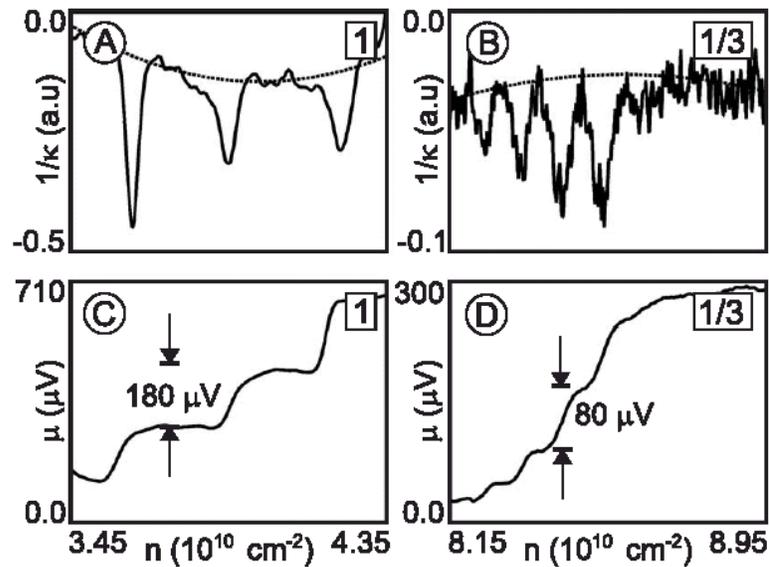


Figura 8.1: Medidas experimentais, em que a ponta de prova com o transistor de único está situada (fixa) no centro de um dos estados localizados observados (antidot). Os dois gráficos de cima mostram as oscilações no sinal detectado em função da variação de densidade em torno da região de fator de preenchimento $\nu = 1$ (A) e $\nu = 1/3$ (B). Eventos discretos de carga são observados. Os gráficos (C) e (D) mostram os respectivos sinais integrados, isto é, o potencial eletrostático em função da densidade, que claramente varia em degraus. Figura retirada da referência [66].

A partir de nossos cálculos de $\Delta\Phi$, podemos prever a evolução do tamanho dos saltos em potencial em gráficos como esse da Figura 8.1C e D. A análise da Figura 7.7 no capítulo anterior mostra, de maneira geral, que os saltos em potencial tornam-se menores com o aumento do número N de partículas (elétrons ou buracos ou quase-partículas) na região compressível considerada (dot ou antidot). Esta observação está então de acordo com o comportamento observado na Figura 8.1, especialmente na parte D da figura, onde os degraus nitidamente tornam-se menores com a redução da densidade (como discutimos, no caso de antidots, reduzir a densidade implica em aumentar o número N de buracos no antidot).

Uma análise quantitativa é possível a partir dos cálculos que apresentamos. Porém, para uma comparação direta com o experimento da Figura 8.1 seria necessário saber a altura z da ponta de prova em relação ao gás de elétrons (não informada no artigo em questão) e ter uma estimativa do raio do antidot. Apesar destes dados não serem informados no artigo em questão, podemos discutir um exemplo de como confrontar direta e quantitativamente os resultados obtidos aqui neste trabalho com os experimentos. Tomemos neste exemplo uma situação em que $\alpha = 200 \text{ nm}$ (de acordo com a Eq.(6.37), para este valor de α , um antidot contendo 10 elétrons tem raio $r = 430 \text{ nm}$). Assim, se o potencial eletrostático estiver sendo detectado pela ponta de microscópio localizada a $z = 100 \text{ nm}$ sobre o centro do dot ($r = 0$), temos $\rho = r/\alpha = 0$ e $\zeta = z/\alpha = 0.5$. ΔF para estes parâmetros vale $\Delta F_{10}(\rho = 0, \zeta = 0.5) = 0.62$ (ver Figura 7.7). Assim, substituindo os parâmetros desse exemplo na Eq.(7.10) tem-se $\Delta\Phi_{10}(r = 0, z = 100\text{nm}) = 620\mu\text{V}$. Usamos aqui a constante dielétrica $\epsilon = 7$, que constitui o valor médio entre as constantes dielétricas do ar e do semicondutor GaAs ($\epsilon = 13$).

Usando os mesmos parâmetros desse exemplo ($\alpha = 200 \text{ nm}$, $\epsilon = 7$, $\rho = 0$ e $\zeta = 0.5$), produzimos o gráfico $\Phi_N \times N$ apresentado na Figura 8.2.

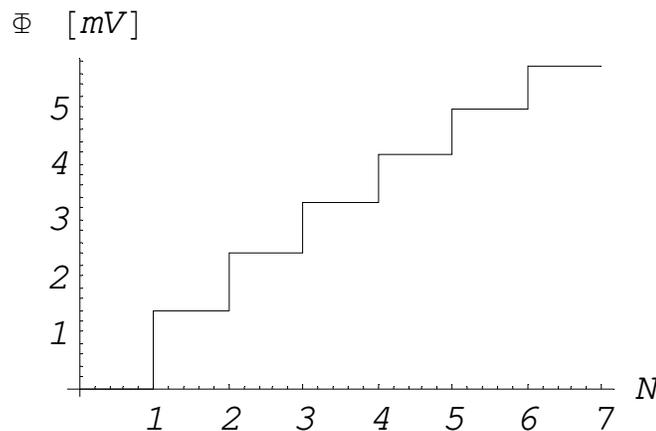


Figura 8.2: *Nossos cálculos mostram o potencial eletrostático variando em degraus conforme o número de elétrons no dot aumenta. Valores ajustados para o caso $\alpha = 200 \text{ nm}$, $\rho = 0$ and $\zeta = 0.5$. Vê-se que o tamanho dos saltos entre patamares diminui com o aumento de N , o número de partículas (buracos ou elétrons).*

Além de mostrar exatamente como os saltos se tornam menores com o aumento de N , os nossos resultados mostram a dependência dessas transições com a altura z de observação do potencial, fato bastante importante para determinar a resolução dos experimentos.

Concluindo, os resultados obtidos oferecem a possibilidade de uma análise quantitativa dos resultados experimentais existentes e futuros, contribuindo para o entendimento dos processos microscópicos envolvidos na localização eletrônica no Efeito Hall Quântico.

Referências

- [1] K. von Klitzing, “*The quantized Hall effect*”, Rev. Mod. Phys. **58**, 519 (1986)
- [2] D. C. Tsui, H. L. Stormer e A. C. Gossard, “*Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit*”, Phys. Rev. Lett. **48**, 1559 (1982)
- [3] R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **50**, 1359 (1983)
- [4] W. Zawadzki, capítulo 13 de “*Physics of Solids in Intense Magnetic Fields*”, editado por E. D. Haidemenakis, *New York: Plenum Press*, 1969
- [5] H. Ibach e H. Luth, capítulo 12 de “*Solid-state physics: an introduction to theory and experiment*”, Berlin: Springer, 1991
- [6] R. B. Laughlin, “*Quantized Hall conductivity in two dimensions*”. Phys. Rev. B **23**, 5632 (1981); R. E. Prange, “*Quantized Hall resistance and the measurement of the fine-structure Constant*”, Phys. Rev. B **23**, 4802 (1981); H. Aoki e T. Ando, Solid State Commun. **38**, 1079 (1981)
- [7] P. W. Anderson Phys. Rev. **109**, “*Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*”, 1492 (1958)
- [8] B. Kramer e A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993); Y. Nagaoka, Prog. Theor. Phys. **84**, (1985); P. W. Anderson, “*Local moments and localized states*”, Rev. Mod. Phys. **50**, 191 (1978)
- [9] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello e T. V. Ramakrishnan, “*Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions*”, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979)
- [10] E. Abrahams, S. V. Kravchenko e M. P. Sarachik, “*Metallic behavior and related phenomena in two dimensions*”, Rev. Mod. Phys. **73**, 251 (2001)

- [11] B. I. Halperin, “*Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential*”, Phys. Rev. B **25**, 2185 (1982)
- [12] R. B. Laughlin, “*Levitation of Extended-State Bands in a Strong Magnetic Field*”, Phys. Rev. Lett. **52**, 2304 (1984)
- [13] D. E. Khmelnitskii, Phys. Rev. Lett. **106A**, 182 (1984)
- [14] H. Levine, S. B. Libby e A. M. M. Pruisken, “*Electron Delocalization by a Magnetic Field in Two Dimensions*”, Phys. Rev. Lett. **51**, 1915 (1983)
- [15] M. M. Fogler, “*Quasiclassical approach to the weak levitation of extended states in the quantum Hall effect*”, Phys. Rev. B **57**, 11947 (1998)
- [16] S. Das Sarma, capítulo 1 de “*Perspectives in Quantum Hall Effects*”, editado por Sankar Das Sarma e Aron Pinzuk - John Wiley Sons, Inc., 1997
- [17] S. Kivelson, D. H. Lee e S. C. Zhang, “*Global phase diagram in the quantum Hall effect*”, Phys. Rev. B **46**, 2223 (1992)
- [18] H. W. Jiang, C. E. Johnson, K. L. Wang e S. T. Hannahs, “*Observation of magnetic-field-induced delocalization: Transition from Anderson insulator to quantum Hall conductor*”, Phys. Rev. Lett. **71**, 1439 (1993)
- [19] T. Wang, K. P. Clark, G. F. Spencer, A. M. Mack e W. P. Kirk, “*Magnetic-field-induced metal-insulator transition in two dimensions*”, Phys. Rev. Lett. **72**, 709 (1994)
- [20] R. J. F. Hughes *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4763 (1994)
- [21] D. Shahar, D. C. Tsui e J. E. Cunningham, “*Observation of the $\nu=1$ quantum Hall effect in a strongly localized two-dimensional system*”, Phys. Rev. B **52**, R14372 (1995)
- [22] S.-H. Song, D. Shahar e D. C. Tsui, “*New Universality at the Magnetic Field Driven Insulator to Integer Quantum Hall Effect Transitions*”, Phys. Rev. Lett. **78**, 2200 (1997)
- [23] C. H. Lee, Y. H. Chang, Y. W. Suen e H. H. Lin, “*Magnetic-field-induced delocalization in center-doped GaAs/Al_xGa_{1-x}As multiple quantum wells*”, Phys. Rev. B **58**, 10629 (1998)

- [24] A. A. Shashkin, G. V. Kravchenko e V. T. Dolgoplov, “*Floating up of the extended states of Landau levels in a two-dimensional electron gas in silicon MOSFET’s*”, JETP Lett. **58**, 220 (1993)
- [25] I. Glozman, C. E. Johnson e H. W. Jiang, “*Fate of the Delocalized States in a Vanishing Magnetic Field*”, Phys. Rev. Lett. **74**, 594 (1995)
- [26] J. E. Furneaux, S. V. Kravchenko, Whitney Mason, G. E. Bowker e V. M. Pudalov, “*Destruction of the quantum Hall effect with increasing disorder*”, Phys. Rev. B **51**, 17227 (1995)
- [27] S. V. Kravchenko, Whitney Mason, J. E. Furneaux e V. M. Pudalov, “*Global Phase Diagram for the Quantum Hall Effect: An Experimental Picture*”, Phys. Rev. Lett. **75**, 910 (1995)
- [28] I. Glozman, C. E. Johnson e H. W. Jiang, “*Path-dependent conductivity in the regime of floating delocalized states*”, Phys. Rev. B **52**, R14348 (1995)
- [29] M. Hilke, D. Shahar, S.-H. Song, D. C. Tsui e Y. H. Xie, “*Phase diagram of the integer quantum Hall effect in p-type germanium*”, Phys. Rev. B **62**, 6940 (2000)
- [30] M. R. Sakr, M. Rahimi e S. V. Kravchenko, “*Fate of the extended states in a vanishing magnetic field: the role of spins in strongly- interacting 2D electron systems*”, Phys. Rev. B **65**, R041303 (2002)
- [31] Ana L. C. Pereira e P. A. Schulz, “*Floating up of extended states filling factors in IQHE systems: true levitation and disorder broadening effects*”, Proceedings da conferência internacional Semi-Mag, realizada em Oxford em 2002 (ver cópia anexa no apêndice B)
- [32] D. Z. Liu, X. C. Xie e Q. Niu, “*Weak Field Phase Diagram for an Integer Quantum Hall Liquid*”, Phys. Rev. Lett. **76**, 975 (1996)
- [33] K. Yang e R. N. Bhatt, “*Floating of Extended States and Localization Transition in a Weak Magnetic Field*”, Phys. Rev. Lett. **76**, 1316 (1996)
- [34] X. C. Xie, D. Z. Liu, B. Sundaram e Q. Niu, “*Transition from the integer quantum Hall state to the insulator state*”, Phys. Rev. B **54**, 4966 (1996)

- [35] D. N. Sheng e Z. Y. Weng, “*Disappearance of Integer Quantum Hall Effect*”, Phys. Rev. Lett. **78**, 318 (1997)
- [36] D. N. Sheng e Z. Y. Weng, Phys. Rev. Lett. **80**, “*New Universality of the Metal-Insulator Transition in an Integer Quantum Hall Effect System*”, 580 (1998)
- [37] K. Yang e R. N. Bhatt, “*Quantum Hall–insulator transitions in lattice models with strong disorder*”, Phys. Rev. B **59**, 8144 (1999)
- [38] Y. Morita, K. Ishibashi e Y. Hatsugai, “*Transitions from the quantum Hall state to the Anderson insulator: Fate of delocalized states*”, Phys. Rev. B **61**, 15952 (2000)
- [39] D. N. Sheng, Z. Y. Weng e X. G. Wen, cond-mat/0003117
- [40] D. N. Sheng e Z. Y. Weng, “*Phase diagram of the integer quantum Hall effect*”, Phys. Rev. B **62**, 15363 (2000)
- [41] Th. Koschny, H. Potempa e L. Schweitzer, “*Levitation of Current Carrying States in the Lattice Model for the Integer Quantum Hall Effect*”, Phys. Rev. Lett. **86**, 3863 (2001)
- [42] Ana L. C. Pereira e P. A. Schulz, “*Extended states floating up in a lattice model: bona fide levitation fingerprints, irrespective of the correlation length*”, Physica E **12**, 650 (2002) (ver cópia anexa no apêndice B)
- [43] Ana L. C. Pereira e P. A. Schulz, “*Quantifying the levitation picture of extended states in lattice models*”, Phys. Rev. B **66**, 155323 (2002) (ver cópia anexa no apêndice B)
- [44] Th. Koschny e L. Schweitzer, “*Levitation of quantum Hall critical states in a lattice model with spatially correlated disorder*”, Phys. Rev. B **67**, 195307 (2003)
- [45] Th. Koschny e L. Schweitzer, “*Levitation of the quantum Hall extended states in the $B \rightarrow 0$ limit*”, Phys. Rev. B **70**, 165301 (2004)
- [46] T. V. Shahbazyan e M. E. Raikh, “*Weak Levitation of 2D Delocalized States in a Magnetic Field*”, Phys. Rev. Lett. **75**, 304 (1995)
- [47] V. Kagalovsky, B. Horovitz e Y. Avishai, “*Landau-level mixing and extended states in the quantum Hall effect*”, Phys. Rev. B **52**, R17044 (1995)

- [48] A. Gramada e M. E. Raikh, “*Short-range impurity in the vicinity of a saddle point and the levitation of the two-dimensional delocalized states in a magnetic field*”, Phys. Rev. B **54**, 1928 (1996)
- [49] F. D. M. Haldane e K. Yang, “*Landau Level Mixing and Levitation of Extended States in Two Dimensions*”, Phys. Rev. Lett. **78**, 298 (1997)
- [50] B. Huckestein, “*Quantum Hall Effect at Low Magnetic Fields*”, Phys. Rev. Lett. **84**, 3141 (2000)
- [51] R. Peierls, Z. Phys. **80**, 763 (1933)
- [52] J. M. Luttinger, “*The Effect of a Magnetic Field on Electrons in a Periodic Potential*”, Phys. Rev. **84**, 814 (1951)
- [53] E. Brown, Phys. Rev. **133**, (4A) 1038 (1964), Greg Watson, Contemp. Phys. **37**, (2) 127 (1996)
- [54] Ana Luiza Cardoso Pereira, Tese de Mestrado defendida no instituto de física da Unicamp em 2001.
- [55] P. G. Harper, Proc. Phys. Soc. London, Sect. A **68**, 879 (1955)
- [56] D. R. Hofstadter, “*Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields*”, Phys. Rev. B **14**, 2239 (1976)
- [57] E. N. Economou, “*Green's Functions in Quantum Physics*”, vol. 7 of “Solid-State Sciences”, 2nd edition (Springer-Verlag, Heidelberg, 1990)
- [58] U. Sivan, Y. Imry e C. Hartzstein, “*Aharonov-Bohm and quantum Hall effects in singly connected quantum dots*”, Phys. Rev. B, **39**, 1242 (1989)
- [59] B. Huckestein, “*Scaling theory of the integer quantum Hall effect*”, Rev. Mod. Phys. **67**, 357 (1995)
- [60] R. J. Bell e P. Dean, Discuss. Faraday Soc. **50**, 55 (1970)
- [61] D. J. Thouless, Phys. Reports **13**, 93 (1974)

- [62] F. Wegner, Z. Phys. **36**, 209 (1980)
- [63] Edwards e Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **5**, 807 (1972)
- [64] T. Ando e Y. Uemura, J. Phys. Soc. Jpn. **36**, 959 (1974)
- [65] S. Ilani., J. Martin, E. Teitelbaum, J. H. Smet, D. Mahalu, V. Umansky and A. Yacoby, “*The microscopic nature of localization in the quantum Hall effect*”, Nature **427**, 328 (2004)
- [66] J. Martin, S. Ilani, B. Verdene, J. Smet, V. Umansky, D. Mahalu, D. Schuh, G. Abstreiter and A. Yacoby, “*Localization of fractionally charged quasi-particles*”, Science **305**, 980 (2004)
- [67] N. B. Zhitenev, T. A. Fulton, A. Yacoby, H. F. Hess, L. N. Pfeiffer and K. W. West, “*Imaging of localized electronic states in the quantum Hall regime*”, Nature **404**, 473 (2000)
- [68] G. Finkelstein, P. I. Glicofridis, R. C. Ashoori and M. Shayegan, “*Topographic mapping of the quantum Hall liquid using a few-electron bubble*”, Science **289**, 90 (2000)
- [69] M. J. Yoo, T. A. Fulton, H. F. Hess, R. L. Willett, L. N. Dunkleberger, R. J. Chichester, L. N. Pfeiffer and K. W. West, “*Scanning Single-Electron Transistor Microscopy: Imaging Individual Charges*” Science **276**, 581 (1997)
- [70] A. L. Efros, “*Density of states of 2D electron gas and width of the plateau of IQHE*”, Solid State Comm. **65**, 1281 (1988)
- [71] D. B. Chklovskii, B. I. Shklovskii and L. I. Glazman, “*Electrostatics of edge channels*”, Phys. Rev. B **46**, 4026 (1992)
- [72] A. L. Efros, F. G. Pikus and V. G. Burnett, “*Density of states of a two-dimensional electron gas in a long-range potential*”, Phys. Rev. B **47**, 2223 (1993)
- [73] N. R. Cooper and J. T. Chalker, “*Coulomb interactions and the quantum Hall effect: screening and transport*”, Phys. Rev. B **48**, 4530 (1993)
- [74] A. L. Efros, “*Electrostatics of an inhomogeneous quantum Hall liquid*”, Phys. Rev. B **60**, 13343 (1999)

- [75] M. M. Fogler, “*Nonlinear screening and percolative transition in a two-dimensional electron liquid*”, Phys. Rev. B **69**, 121409R (2004); M. M. Fogler, “*Electrostatics of two-dimensional structures: exact solutions and approximate methods*”, Phys. Rev. B **69**, 245321 (2004)
- [76] T. Deruelle, K. Ensslin, P. M. Petroff, A. L. Efros and F. G. Pikus, “*Effective size of scattering centers in a two-dimensional electron gas*”, Phys. Rev. B **45**, 9082 (1992)
- [77] I. N. Sneddon, “*Mixed boundary value problems in potential theory*” North-Holland, Amsterdam, 1966.
- [78] M. M. Fogler, E. I. Levin and B. I. Shklovskii, Phys. Rev. B **49**, 13767 (1994)
- [79] V. G. Burnett, A. L. Efros and F. G. Pikus, Phys. Rev. B **48**, 14365 (1993)
- [80] J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer and K. W. West, “*Compressibility of the two-dimensional electron gas: measurements of the zero-field exchange energy and fractional quantum Hall gap*”, Phys. Rev. B **50**, 1760 (1994)

APÊNDICE A

Restrições sobre μ

Para satisfazer a condição imposta pela Eq. (6.4), vimos que é necessário satisfazer a Eq. (6.16):

$$-e \int_0^{r_d} dt \frac{f(t)}{\sqrt{r^2 - t^2}} > \mu - V_{imp}(r) \quad \text{at } r > r_d. \quad (\text{A.1})$$

Substituindo-se a expressão para $f(t)$ (Eq. (6.22)), a qual é válida no limite de integração considerado, tem-se

$$\begin{aligned} -e \int_0^{r_d} dt \frac{f(t)}{\sqrt{r^2 - t^2}} &= -\frac{2}{\pi} \int_0^{r_d} dt \frac{(2Kt^2 - \mu)}{\sqrt{r^2 - t^2}} \\ &= -\frac{2}{\pi} \left\{ (Kr^2 - \mu) \text{ArcSin} \left(\frac{r_d}{r} \right) - Kr_d \sqrt{r^2 - r_d^2} \right\} > \mu - V_{imp}(r). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Enquanto esta expressão é válida para $r > r_d$, a definição de $V_{imp}(r)$ (Eq. 6.2) é válida para $r \leq r_d$. Mas no limite de $r \rightarrow r_d$, isto é, para $r = r_d + \epsilon$ com $\epsilon \rightarrow 0$, pode-se considerar $V_{imp}(r) \approx Kr^2$. Nesse limite,

$$-\frac{2}{\pi} \left\{ [K(r_d + \epsilon)^2 - \mu] \text{ArcSin} \left(\frac{r_d}{r_d + \epsilon} \right) - Kr_d \sqrt{(r_d + \epsilon)^2 - r_d^2} \right\} > \mu - K(r_d + \epsilon)^2. \quad (\text{A.3})$$

Então

$$[K(r_d + \epsilon)^2 - \mu] \left\{ 1 - \frac{2}{\pi} \text{ArcSin} \left(\frac{r_d}{r_d + \epsilon} \right) \right\} + \frac{2Kr_d}{\pi} \sqrt{(r_d + \epsilon)^2 - r_d^2} > 0. \quad (\text{A.4})$$

$$\text{Mas, para } \epsilon \rightarrow 0: \quad \begin{cases} \text{ArcSin} \left(\frac{r_d}{r_d + \epsilon} \right) \approx \frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{2\epsilon}{r_d}} \\ (r_d + \epsilon)^2 \approx r_d^2 + 2r_d \epsilon \end{cases}$$

Assim,

$$[Kr_d^2 + 2Kr_d \epsilon - \mu] \left\{ 1 - 1 + \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2\epsilon}{r_d}} \right\} + \frac{2Kr_d}{\pi} \sqrt{r_d^2 + 2r_d \epsilon - r_d^2} > 0. \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2\epsilon}{r_d}} (Kr_d^2 + 2Kr_d \epsilon - \mu) + \frac{2Kr_d}{\pi} \sqrt{2r_d \epsilon} > 0. \quad (\text{A.6})$$

Dividindo tudo por $\frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2\epsilon}{r_d}}$:

$$(Kr_d^2 + 2Kr_d \epsilon - \mu) + Kr_d^2 > 0. \quad (\text{A.7})$$

$$\mu < 2K(r_d^2 + r_d \epsilon). \quad (\text{A.8})$$

Assim, para $\epsilon \rightarrow 0$, a condição (A.1) não é satisfeita para $\mu > 2Kr_d^2$.

APÊNDICE B

Publicações Geradas por este Trabalho

- 1) Ana L. C. Pereira e P. A. Schulz, “*Extended states floating up in a lattice model: bona fide levitation fingerprints, irrespective of the correlation length*”, Physica E **12**, 650 (2002)
- 2) Ana L. C. Pereira e P. A. Schulz, “*Quantifying the levitation picture of extended states in lattice models*”, Phys. Rev. B **66**, 155323 (2002)
- 3) Ana L. C. Pereira e P. A. Schulz, “*Quantitative analysis of the levitation of extended states in integer quantum Hall effect systems*”, Proceedings of the 26th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS), realizada em Edimburgo, em julho de 2002
- 4) Ana L. C. Pereira e P. A. Schulz, “*Floating up of extended states filling factors in IQHE systems: true levitation and disorder broadening effects*”, Proceedings of the 15th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics (SemiMag), realizada em Oxford - UK, em agosto de 2002
- 5) L. Moriconi, Ana. L. C. Pereira e P. A. Schulz, “*Hidden scaling in quantum Hall metal-insulator transition*”, Phys. Rev. B **69**, 045109 (2004)
- 6) Ana L. C. Pereira e J. T. Chalker, “*Electrostatic theory for imaging experiments on local charges in quantum Hall systems*”, Physica E **31**, 155 (2006)