

Levitação de Estados Estendidos em Sistemas que Apresentam Efeito Hall Quântico

Ana Luiza Cardoso Pereira

orientador: Peter A. B. Schulz

Dissertação para obtenção do título de Mestre em Física

Campinas, 23 de julho de 2001

DFMC - IFGW - UNICAMP

23 de julho de 2001...

Esta tese foi defendida no mesmo dia
em que meu querido tio Aquiles partiu.
Dedico-a especialmente a ele (em memória) e
àqueles que infelizmente não puderam assistir à defesa:

aos meus avós, Heitor e Luiza;
aos meus tios Nani, Beto, Tuda, Flávio e Helô;
e à minha mãezinha querida.

Agradecimentos

Produzir e escrever esta tese não foi uma das tarefas mais fáceis que já realizei até hoje... Foi pra mim um caminho de grande aprendizado, amadurecimento profissional e pessoal, descobertas, realizações e também de muito trabalho e dedicação. Tive a sorte de poder contar o tempo todo ao longo dessa caminhada com grande apoio, encorajamento, amizade e carinho daqueles que estavam à minha volta. Tenho muito a agradecer:

- ao prof. Peter, por ter sido um excelente orientador. Agradeço pela sugestão do problema, pelas inúmeras discussões, pela paciência, respeito, incentivo e amizade. Agradeço principalmente pela grandeza de sua preocupação com a minha formação: acompanhando o trabalho sempre de perto e, ao mesmo tempo, dando-me espaço, depositando confiança em mim e valorizando o meu trabalho. Foi um grande prazer dividir todo esse processo com ele.

- aos professores Eduardo Miranda, José Brum, Amir Caldeira e Eduardo Mucciolo, com os quais tive o privilégio de trocar idéias sobre este trabalho. Agradeço por algumas importantes sugestões e principalmente pelo incentivo.

- ao prof. Eduardo Mucciolo, em especial, por durante a minha graduação na PUC-Rio, ter me apresentado a física dos sistemas mesoscópicos, sendo o melhor orientador de iniciação científica que eu poderia ter tido. Agradeço também por ter me indicado o prof. Peter quando eu quis vir para a Unicamp e pelo constante apoio.

- a todos os professores e colegas do GPO: prof. Fernando Iikawa, prof^a. Maria José, prof. Cerdeira, prof. Brum, prof. Eliermes, Evaldo, Luis Ogando, Hugo, Márcio, Helô, Gustavo, Edson Laureto, Edson Ribeiro, Michel, Alexandre Reily, Rodrigo Dracena, Marcelo Nakaema e outros que por lá passaram... pelas discussões nas reuniões de grupo de sexta-feira e pela amizade. E também à Lene, secretária do grupo, pela ajuda sempre eficiente e pela simpatia.

- à Maria Ignez, Armando, del Carmem e Carlinhos, da secretaria da pós, por todo o apoio com as muitas burocracias.

- à FAPESP, pelo suporte financeiro.

- aos grandes amigos que fiz na pós: ao pessoal da turma de 94 que me recebeu de volta à Unicamp de braços abertos: Alexandre (Cabelo), Cínthia, Júlio, Laura, Ana Lúcia, Henrique, Vitor, André Guimarães...; à Roma, amiga de todas as horas; à Carol, Caetano e Patricinha, Renato, Lázaro, Pila, Marta, Marcelo, Scheila, Fabinho, Michel, Ana Melva, Josi, Doretto, Ana Cláudia, Daniela, Jeferson, Marcus e, felizmente, tantos outros... por toda a amizade, ajuda, conversas, risadas, compreensão...

- aos queridos colegas que, juntamente comigo e com o Cristiano, fizeram parte da diretoria da APGF em 2000: Alexandre (Cabelo), Jeferson, Henrique, Josi, Cínthia, Marcus e Ana Lúcia. Foi uma experiência muitíssimo rica participar dessa empreitada com vocês.

- aos meus amigos do Rio, pelo apoio e por continuarem sempre tão próximos e tão amigos. Em especial às queridas Mariana, Mari Abreu, Robert, Luciene, Juliana, Cibele e Taty.

- ao tio Flávio e à tia Rô, por terem me acolhido como filha em Campinas e pela enorme ajuda que me deram em todos os momentos em que precisei.

- à Leni, por toda a ajuda, dedicação e carinho.

- aos meus pais: Pedro e Élvia, e irmãos: Rafa e Mi, pelo infinito amor que recebo e sempre recebi. Por toda a alegria e segurança que sinto por ter uma família tão unida. O apoio e o calor de vocês foram fundamentais.

- ao Cris, meu grande companheiro e amigo, pelo especial apoio, por todo o seu amor e carinho. Por sempre ter me dado um lugar tão grande e bonito no seu coração, sendo extremamente compreensivo e paciente comigo.

A todos, muito obrigada por tudo!

Resumo

Neste trabalho é investigada numericamente a questão da levitação de estados estendidos em sistemas eletrônicos bidimensionais submetidos a campo magnético. Poucos anos após a descoberta do Efeito Hall Quântico, Laughlin e Khmelnitskii propuseram que os estados estendidos do centro das bandas de Landau deveriam *levitar* em energia, ultrapassando o nível de Fermi, à medida que o campo magnético tendesse a zero ou a desordem no sistema fosse suficientemente aumentada. Esta proposta de levitação implica em importantes conseqüências para as propriedades de transporte destes sistemas, em particular prevendo transições de fase tipo metal-isolante induzidas por campo magnético. Entretanto, trata-se apenas de uma conjectura, que apesar de estar sendo bastante discutida nos últimos anos, ainda envolve muitas controvérsias e o entendimento da questão ainda contém diversos pontos em aberto.

Este trabalho vem dar algumas contribuições para o entendimento deste problema. As simulações numéricas utilizadas envolvem um modelo de rede bidimensional tratada na aproximação *tight-binding*, considerando elétrons não-interagentes. O grau de localização dos estados eletrônicos é inferido através do cálculo da Razão de Participação. Foi possível identificar claramente a ocorrência do processo de levitação dos estados estendidos, para ambos os modelos de desordem estudados: desordem não-correlacionada tipo ruído branco e desordem correlacionada. Foram obtidas expressões para a dependência da magnitude de levitação observada em função da variação da desordem ou do campo magnético. Estas análises quantitativas permitiram estabelecer comparações quanto à levitação, entre os diferentes modelos de desordem e também entre diferentes bandas de Landau. Os resultados obtidos contribuem para a montagem do real Diagrama de Fases para o Efeito Hall Quântico Inteiro.

Abstract

In this work the levitation of extended states in two dimensional electron systems in the presence of magnetic field is numerically investigated. Few years after the discovery of the Quantum Hall Effect, Laughlin and Khmelnitskii conjectured that the extended states at the Landau level centers should levitate in energy, rising above the Fermi energy, for vanishing magnetic field or sufficiently increasing disorder. This hypothesis leads to important consequences to the transport properties of the system, particularly on the magnetic field induced metal-insulator transitions in two dimensions. This conjecture, however, involves many controversial points and, although intensively investigated in the past few years, many open questions remain unanswered.

The present work gives some contributions for understanding the problem. The numerical approach uses two dimensional lattice models treated in a tight-binding framework, considering non interacting electrons. The degree of localization of the electronic states is inferred from Participation Ratios calculations. It was possible to clearly identify the levitation of extended states for both disorder models studied: uncorrelated white-noise like and gaussian correlated disorder. Simple expressions for the magnitude of levitation as a function of either magnetic field or disorder could be obtained. These quantitative analysis lead to comparisons among different disorder models, as well as Landau band indexes, concerning the levitation. The present results shed some light on the building of the actual Phase Diagram for the Quantum Hall Effect.

Conteúdo

1	Introdução	1
1.1	Efeito Hall Quântico Inteiro	1
1.1.1	Sistemas Bidimensionais	5
1.1.2	Efeitos de Campo Magnético em 2D	7
1.1.3	Efeitos de desordem (localização eletrônica)	10
1.2	Levitação de Estados Estendidos	13
1.2.1	A conjectura de Laughlin e Khmel'nitskii	13
1.2.2	Diagrama de Fases Global do EHQI	16
1.2.3	Atual entendimento do problema	18
1.3	Roteiro para os próximos capítulos	19
2	Modelo Numérico	21
2.1	Hamiltoniano <i>tight-binding</i>	21
2.2	Modelos de Desordem	22
2.2.1	Desordem tipo ruído branco	22
2.2.2	Desordem Correlacionada	23
2.3	Inclusão do Campo Magnético	25
2.4	Modelo de Rede X Modelo Contínuo	29
2.5	Espectros de Energia	32
2.5.1	Borboleta de Hofstadter	32
2.5.2	Limite Contínuo dos Espectros	33
2.5.3	Espectro na Presença de Desordem	35
2.5.4	Condições de Contorno Periódicas	36

2.6	Razão de Participação	38
3	Resultados I :	
	Desordem tipo Ruído Branco	41
3.1	Densidade de Estados	41
3.2	Localização dos Estados: cálculo da Razão de Participação	47
3.3	Variando a desordem	49
3.3.1	Evidências da levitação	49
3.3.2	Quantificando a levitação pelo desvio $\delta E/E$	53
3.4	Variando o fluxo magnético	55
3.4.1	Evidências da levitação	55
3.4.2	Quantificando a levitação pelo desvio $\delta E/E$	59
3.5	$\delta E/E$ em função do alargamento relativo da banda	60
3.6	Levitação em Fator de Preenchimento	62
4	Resultados II :	
	Desordem Correlacionada	67
4.1	Densidade de Estados	67
4.2	Localização dos Estados: cálculo da Razão de Participação	71
4.3	Levitação em energia	73
4.3.1	Quantificando a levitação	74
4.4	Levitação em Fator de Preenchimento	77
5	Conclusões	81
A	Alguns resultados experimentais sobre a levitação	85
B	Alguns resultados analíticos sobre a levitação	89

Capítulo 1

Introdução

Este trabalho insere-se na área da Física de sistemas mesoscópicos, estudando propriedades de transporte e de localização eletrônica em sistemas de baixa dimensionalidade. A quantização dos níveis de energia em sistemas bidimensionais na presença de campo magnético, está intimamente relacionada à observação do Efeito Hall Quântico Inteiro, descoberto em 1980. Trata-se da descoberta de um fenômeno fundamental, cujo estudo subsequente tem atraído grande interesse dentro da Física da Matéria Condensada.

Veremos na primeira parte desta Introdução as bases da Física envolvida no Efeito Hall Quântico Inteiro e depois focalizaremos a questão específica que estudamos neste trabalho, a questão da levitação de estados estendidos das bandas de Landau.

1.1 Efeito Hall Quântico Inteiro

A descoberta da quantização da resistência Hall, que caracteriza o Efeito Hall Quântico (EHQ), foi feita em 1980 por Klaus von Klitzing [1]. Antes de discutir o EHQ, vale relembrar rapidamente como é o Efeito Hall original, agora chamado de 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 (para, por exemplo, determinar a concentração de portadores de carga de um dado semiconductor).

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. Por meio de eletrodos, faz-se passar uma corrente elétrica I ao longo de uma das

direções da amostra. São então medidas duas voltagens características. A primeira, V , é medida ao longo da direção de passagem da corrente e, quando dividida pela corrente fornece a resistência R do material. A outra voltagem, V_H , é medida na direção perpendicular à passagem da corrente, como mostra a Figura (1.1). Sem campo magnético, nenhuma diferença de potencial é medida nessa segunda direção. 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 razão V_H/I é conhecida como resistência Hall (R_H) e tem-se $R_H \propto B$.

Por outro lado, a voltagem V é usualmente independente do campo magnético. A conhecida explicação para este efeito é a seguinte: na presença do campo magnético, os elétrons que estavam se movendo 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 .

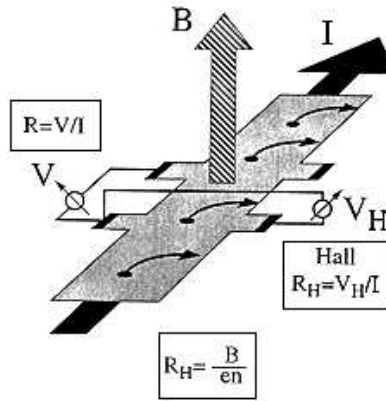


Figura 1.1: Representação esquemática de um experimento Hall. O campo magnético B é perpendicular ao plano do material e à corrente I . Os pontos pretos representam os elétrons, que sentem a força de Lorentz devida ao campo magnético e sofrem desvio lateral, acumulando-se em um dos lados do material.

Naturalmente, quanto maior B , maior V_H . 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 voltagem 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 (ver seção 1.1.1 sobre 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).

A relevância da descoberta do EHQ fez com que, em 1985, Klaus von Klitzing fosse premiado com o Nobel da Física.

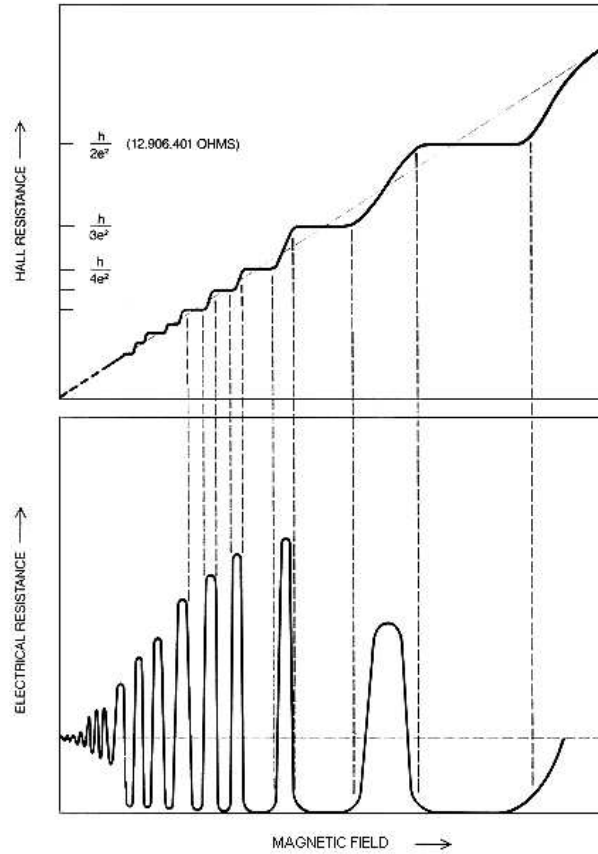


Figura 1.2: O Efeito Hall Quântico manifesta-se como platôs na resistência Hall R_H (acima), que coincidem com as regiões em que a resistência elétrica R , vai a zero (abaixo). Em contraste, no experimento clássico (linha tracejada) R_H aumenta linearmente com o campo magnético e R é constante.

Em 1982, Daniel Tsui, Horst Stormer e Arthur Gossard [2] observaram platôs adicionais ocorrendo quando na equação (1.2) i assume valores fracionários: $1/3$, $2/3$, $2/5$, $3/5$, etc... Este ficou conhecido como Efeito Hall Quântico Fracionário enquanto o primeiro passou a ser chamado de Efeito Hall Quântico Inteiro (EHQI). Não será discutida aqui a explicação do efeito fracionário, que envolve considerar os efeitos de interações elétron-elétron e foge à área de interesse deste trabalho. Nosso interesse é o EHQI.

Para explicar o EHQI, a origem dos platôs em R_H e dos mínimos em R , veremos que é essencial o fato de estarmos em 2D, por isso discutiremos brevemente na seção 1.1.1 como

são obtidos os gases de elétrons bidimensionais. Na seção 1.1.2 veremos o efeito de campo magnético em 2D (a formação dos níveis de Landau). Depois, na seção 1.1.3 serão apresentados os conceitos de estados estendidos e localizados, e discutido o papel fundamental desempenhado pela desordem na interpretação do EHQL.

1.1.1 Sistemas Bidimensionais

Basicamente são dois os tipos de sistemas mais largamente utilizados para gerar um sistema eletrônico bidimensional: MOSFET's de Silício e heterojunções de GaAs/AlGaAs.

Nos MOSFET's de Silício (a sigla vem do inglês *Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor*), os elétrons são confinados na interface entre um semiconductor (Silício) e um isolante (Óxido de Silício). Os elétrons são “empurrados” contra o óxido pela aplicação de um campo elétrico. Mas o chamado gás de elétrons bidimensional também pode ser criado na interface entre dois diferentes tipos de semicondutores, como as heterojunções de GaAs/AlGaAs. O balanço autoconsistente entre o diagrama de potencial na interface (diferença entre as energias dos *gaps* do GaAs e do AlGaAs) e a redistribuição de carga originária da dopagem da barreira dão origem à formação de um poço de potencial triangular (como esquematizado na Figura (1.3-a)).

Não serão aqui explicados maiores detalhes dos processos de crescimento e produção destes sistemas. Algumas revisões sobre este assunto podem ser encontradas em [3, 4]. Discutiremos apenas os princípios físicos envolvidos neste confinamento ao plano bidimensional.

Nos dois casos mencionados, os poços quânticos formados são poços aproximadamente triangulares. No entanto, para descrever a física destes sistemas bidimensionais vamos usar o tradicional exemplo do poço quadrado formado numa heterojunção dupla AlGaAs/GaAs/AlGaAs. De fato, um gás de elétrons bidimensional também pode ser obtido num sistema deste tipo, ou seja, num “sanduíche” de uma fina camada (~ 10 nm) de um semiconductor entre camadas de outro semiconductor de *gap* maior. A Figura (1.3-b) ilustra a situação descrita, mostrando a formação do poço de potencial na região do GaAs, onde são gerados níveis discretos de energia.

Assim, a energia na direção z (na direção da espessura da amostra), passa a ser quantizada. Enquanto isso, o movimento no plano xy continua sendo descrito pela relação de dispersão parabólica característica de um elétron num semiconductor:

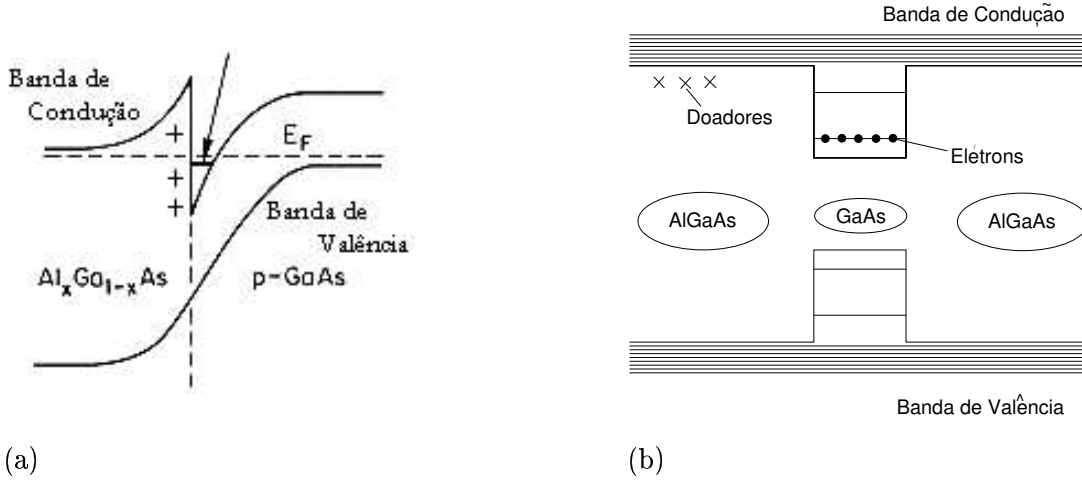


Figura 1.3: Esquemas dos poços quânticos, onde se observa a formação do gás de elétrons bi-dimensional. (a) Poço triangular formado numa interface AlGaAs/GaAs . (b) Poço quadrado $\text{AlGaAs/GaAs/AlGaAs}$.

$$E_{xy} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.3)$$

Portanto a energia total de um elétron será dada por:

$$E = E_z + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.4)$$

e sua forma está representada na Figura (1.4).

A baixas temperaturas ($T < 4\text{K}$) e baixas densidades de portadores, apenas a primeira sub-banda estará ocupada. Se a posição do nível de Fermi 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 ao plano bidimensional.

A descoberta do EHQ foi feita em MOSFET de silício. A interface do GaAs/AlGaAs fornece uma paisagem de potencial muito mais suave do que os MOSFET's para o movimento dos elétrons no plano. O altíssimo controle do crescimento do material, permite posicionar as impurezas (centros espalhadores) distantes da camada de inversão, dando origem a altas mobilidades nas heteroestruturas de GaAs . As diferenças entre os dois tipos de materiais serão

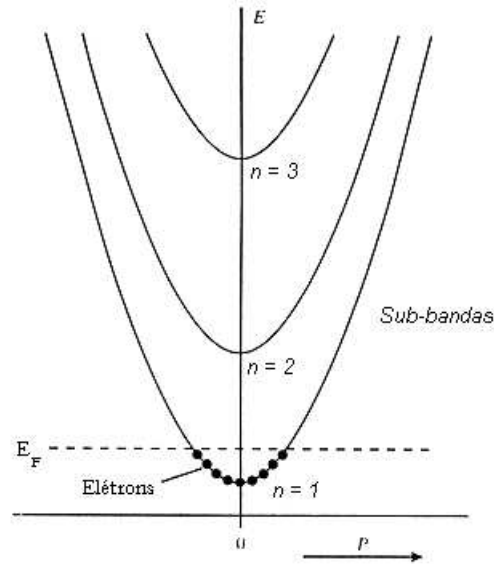


Figura 1.4: Energia total de um elétron num sistema confinado na direção z . Resultante da soma dos níveis discretos de energia na direção z , com a relação de dispersão parabólica do elétron livre no plano xy . Na situação esquematizada na figura, em que apenas a primeira sub-banda está ocupada, tem-se o gás de elétrons bidimensional.

importantes mais adiante, quando discutirmos as diferenças entre os modelos de desordem que consideramos nas simulações realizadas neste trabalho.

O EHQ é um efeito característico de sistemas 2D - não se manifesta em 3D, por razões que serão discutidas a seguir.

1.1.2 Efeitos de Campo Magnético em 2D

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 EHQI. Os níveis de Landau são igualmente espaçados, sendo a separação entre eles igual a $\hbar\omega_c$ (para uma dedução da expressão (1.5), ver referência [5]).

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 , conforme está evidenciado na Figura (1.5).

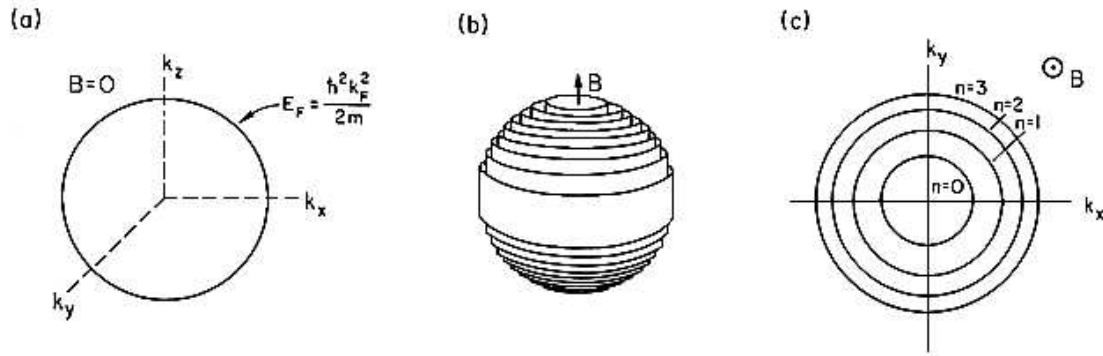


Figura 1.5: Representações da superfície de Fermi no espaço $\vec{k}$. (a) Em 3D e sem campo magnético, tem-se a superfície esférica de Fermi. (b) Ainda em três dimensões, mas na presença de campo magnético intenso na direção z , surgem os níveis de Landau no plano xy que fazem com que a esfera de Fermi seja “fatiada” em cilindros concêntricos. Entretanto, como não há *gaps* em k_z , não há restrições para k^2 . (c) Se o sistema for bidimensional, têm-se *gaps* evidentes na energia cinética.

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 [4]:

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

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. Chamando este número de d (a *degenerescência* dos níveis), temos:

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

Para chegar a esta expressão (1.7) de um modo simples, podemos fazer as seguintes considerações. Sem campo magnético, o número (n) de estados por unidade de área num intervalo de energia ΔE será:

$$n = g(E)\Delta E \quad (1.8)$$

Para $B \neq 0$, todos os estados anteriormente contidos no intervalo de energia $\hbar\omega_c$ passarão a estar degenerados em um único nível de Landau. Assim, fazendo $\Delta E = \hbar\omega_c$ na expressão (1.8), o número de estados por nível de Landau será:

$$d = g(E)\hbar\omega_c = \frac{eB}{h} \quad (1.9)$$

Para se chegar a esta última igualdade foram usadas a equação (1.6) para $g(E)$ e $\omega_c = eB/m^*$. Deve-se observar que 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 de (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: $n = i d$. 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 equação (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.

1.1.3 Efeitos de desordem (localização eletrônica)

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, a impurezas presentes na constituição do material, etc... Por mais cuidadosa que seja a 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. Com isso, alguns elétrons podem ficar presos a estes desvios de potencial (estados localizados), podendo ter suas energias deslocadas da energia exata E_N do nível de Landau. Este deslocamento em relação a E_N será maior ou menor dependendo da intensidade da flutuação de potencial. Assim, a presença de desordem

provoca o alargamento dos níveis de Landau, que passam a formar bandas, como mostra a Figura (1.6).

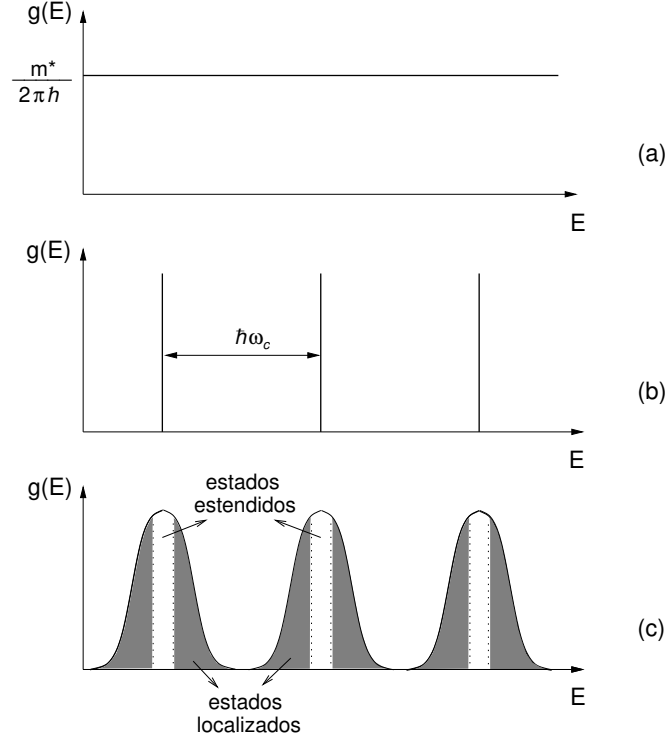


Figura 1.6: Densidade de Estados por unidade de área e por unidade de energia, $g(E)$, em um sistema bidimensional. (a) Para $B = 0$, a densidade de estados tem valor constante $m^*/2\pi\hbar^2$. (b) Para $B \neq 0$, e em um sistema perfeitamente ordenado, os estados são degenerados nos níveis de Landau.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

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 a 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. (Esta é uma visão bastante geral do problema de localização de Anderson. Uma discussão mais detalhada pode ser encontrada, por exemplo, nas referências [8]).

A formação dos platôs Hall pode ser explicada pela presença de estados estendidos no centro das bandas e de estados localizados nos extremos, numa disposição de acordo com o esquema da Figura (1.6-c).

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 nos extremos das bandas (nas regiões de estados localizados), 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.

Falta ainda justificar a outra característica do Efeito Hall Quântico: os zeros na resistência longitudinal. Estes zeros são explicados pela ausência de possibilidade de espalhamento. Os zeros em R 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).

1.2 Levitação de Estados Estendidos

A explicação do EHQI (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. Surge portanto a questão de como os estados estendidos evoluem para o limite localizado à medida que o campo magnético B tende a zero. Analogamente, cabe perguntar qual o destino dos estados estendidos quando o potencial aleatório (ou seja, o grau de desordem) for suficientemente forte de modo que todos os estados sejam localizados. O primeiro a chamar a atenção para esta questão foi B. I. Halperin em 1982 [10].

1.2.1 A conjectura de Laughlin e Khmelnitskii

Em 1984, R. B. Laughlin [11] e D. E. Khmelnitskii [12], 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 [11, 12]:

$$E_N^e = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c \left[1 + \frac{1}{(\omega_c \tau)^2}\right] \quad (1.10)$$

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 $\omega_c \tau \sim 1$ 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 (1.7). 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).

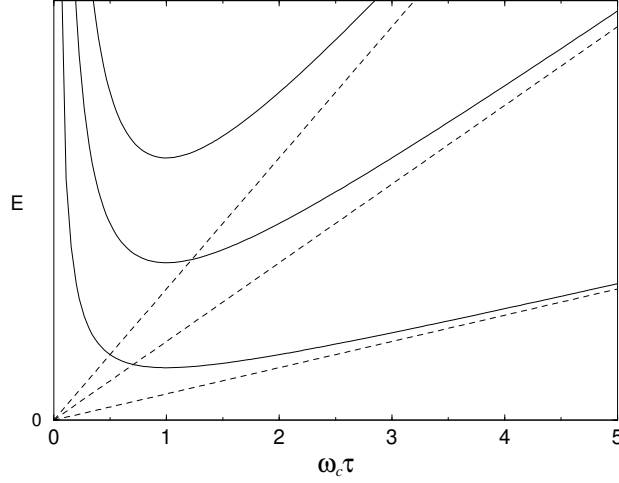


Figura 1.7: Esquema da levitação de estados estendidos, de acordo com as referências [11, 12]. As linhas tracejadas correspondem às energias dos níveis de Landau $N = 0$, $N = 1$ e $N = 3$.

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

Para chegar à expressão (1.10), Laughlin e Khmelnitskii basearam-se em argumentos de teoria de escala [13] que sugeriam que as energias dos estados estendidos poderiam ser obtidas solucionando-se a equação:

$$\sigma_{xy}(E_F = E_N^e) = (N + \frac{1}{2}) \frac{e^2}{h} \quad (1.11)$$

onde σ_{xy} é a condutância Hall. É importante notar que a equação (1.11) se trata de uma conjectura e, como coloca M. M. Fogler [14], “sofre da ausência de uma derivação completamente satisfatória a partir de leis de escala”. (Para uma discussão sobre este assunto, ver também referências [15] e [16]). 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 (1.11).

A sugestão de Laughlin [11] e Khmelnitskii [12] foi então equacionar a expressão (1.11) com a expressão clássica para a condutância (válida para pequenos comprimentos de escala), dada pela fórmula de Drude-Lorentz [4]:

$$\sigma_{xy}^{class.} = \sigma_0 \frac{\omega_c \tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} \quad (1.12)$$

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 (1.11) e (1.12), tem-se:

$$n(E_N^e) = \left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{m^* \omega_c}{h} \left[1 + \frac{1}{(\omega_c \tau)^2}\right] \quad (1.13)$$

Finalmente, como a densidade eletrônica por unidade de área em um sistema bidimensional é dada por $n(E) = (m^*/2\pi\hbar^2)E$ (ver equação (1.8), chega-se à equação (1.10) para as energias dos estados estendidos.

1.2.2 Diagrama de Fases Global do EHQI

Considerando que os estados estendidos dos sistemas onde se observa o Efeito Hall Quântico evoluam exatamente conforme a proposta de levitação (equação (1.10)), S. Kivelson, D. H. Lee e S. C. Zhang [16] propuseram um diagrama de fases para o EHQI.

A representação das diferentes fases do efeito Inteiro, mostrada na Figura (1.8-a), 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 [16] sugere também um mapeamento para o efeito Fracionário e é conhecido como Diagrama de Fases Global para o Efeito Hall Quântico. Será discutido aqui somente o mapeamento do EHQI.

No diagrama da Figura (1.8-a), 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).

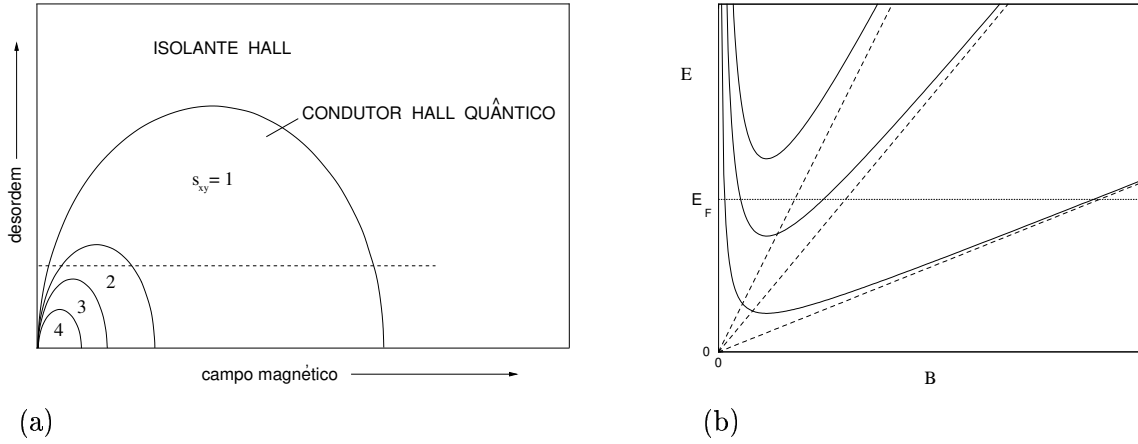


Figura 1.8: (a) Diagrama de Fases Global para o Efeito Hall Quântico Inteiro. (b) Esquema da levitação de estados estendidos.

As fases indicadas pelos índices ($s_{xy} = 1, 2, 3, \dots$) 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 s_{xy} correspondem portanto exatamente aos índices i das resistências Hall quantizadas do EHQI, ou seja, $R_{xy} = h/ie^2 = h/s_{xy}e^2$.

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 de Líquido de Hall, 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 [4]) 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 (1.8-b) pela linha pontilhada. O grau de desordem representado nesta figura (que como vimos, é fixo) equivale, no diagrama, aproximadamente à posição de desordem fixa indicada pela linha tracejada. Ou seja, conforme o campo B é reduzido, na 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 nível de Fermi passa pelo primeiro e pelo segundo platôs. Depois, na região de baixos campos, reduzindo mais ainda o campo B , os estados estendidos voltam a cruzar o nível de Fermi desta vez ultrapassando-o, 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 (1.8-b) 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, pode-se ter 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.

1.2.3 Atual entendimento do problema

Tem havido ultimamente um grande interesse em torno deste problema de levitação de estados estendidos em sistemas 2D, no limite de baixos campos magnéticos e/ou fortes desordens. Como a questão é relativamente recente, ainda é possível tentar listar os trabalhos existentes até aqui que a abordaram e discutiram. Os trabalhos experimentais investigando o assunto são: [17-28]; as abordagens numéricas são encontradas nas referências [29-38]; e os estudos analíticos realizados encontram-se em [14, 39-42]. Por fim, algumas revisões e considerações sobre o tema foram publicadas nas referências [15, 43]. Esta lista não pretende absolutamente encerrar todos os trabalhos que de algum modo mencionaram a questão da levitação, mas sim servir como um guia bastante abrangente, contendo as principais contribuições, para quem quiser nesta questão se aprofundar.

O Diagrama de Fases Global para o EHQ, proposto em 1992, oito anos após a conjectura de Laughlin e Khmel'nitskii, teve papel fundamental na renovação de interesse neste problema (observe-se que todas as referências acima listadas são datadas a partir de 1993). Isto porque a esquematização do diagrama, conforme visto na seção 1.2.2, tornou mais evidentes as consequências da proposta de levitação. Entretanto, uma vez que a levitação foi conjecturada baseando-se em argumentos fracamente fundamentados, não tendo sido derivada a partir de considerações microscópicas, estabeleceu-se a necessidade de maiores investigações, para se tentar verificar se os estados estendidos levitam ou não.

A controvérsia em torno da questão tem sido grande. Experimentalmente foram reportados a princípio resultados que dão suporte ao diagrama e à levitação [18-21] e, posteriormente, outros que apresentam violações a estas propostas [23, 25-28] (no Apêndice A são discutidos em mais detalhes os trabalhos experimentais sobre a levitação).

Além disso, os indícios de levitação observados experimentalmente foram algumas vezes questionados por trabalhos numéricos [29, 31, 32], que propuseram outros cenários para a evolução de estados estendidos, sem levitação, mas que também explicariam os resultados experimentais. Por outro lado, evidências de levitação foram também obtidas através de modelos numéricos [30, 34-38], ainda que geralmente de forma qualitativa e, muitas vezes, apresentando divergências em relação à proposta original para a levitação. Alguns resultados relevantes de trabalhos numéricos serão discutidos ao longo desta tese, em comparação com os

resultados que obtivemos. No Apêndice B são comentados os trabalhos analíticos existentes sobre esta questão.

Embora a maioria dos pesquisadores deste problema pareçam estar atualmente a favor da existência de levitação, ainda há muitos pontos em aberto ou precisando ser melhor entendidos. O principal ponto é que a levitação dos estados estendidos parece não ocorrer exatamente da forma proposta pela equação (1.10). Porém ainda não há um consenso de qual seja a forma exata da levitação. Este trabalho vem dar algumas contribuições na direção do entendimento e montagem do real quadro de levitação de estados estendidos.

1.3 Roteiro para os próximos capítulos

Para investigar a questão da levitação dos estados estendidos discutida aqui neste capítulo introdutório, fazemos simulações numéricas de sistemas bidimensionais na presença de campo magnético e de desordem. O modelo numérico utilizado será apresentado a seguir, no Capítulo 2. As discussões contidas neste Capítulo 2 são de grande importância para justificar a adequação do modelo ao sistema físico que queremos estudar.

Os resultados obtidos serão apresentados divididos em dois capítulos, de acordo com o modelo de desordem considerado: desordem não-correlacionada tipo ruído branco (Capítulo 3) ou desordem correlacionada (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, em ambos os modelos de desordem, 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.

As principais contribuições deste trabalho ao entendimento do problema de levitação delineado nesta Introdução são resumidas no Capítulo 5, de conclusões.

Capítulo 2

Modelo Numérico

2.1 Hamiltoniano *tight-binding*

Se considerarmos um material ideal, perfeitamente ordenado, o estudo de suas propriedades é relativamente simples. Tem-se nesse caso 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 simulações numéricas que incorporem a desordem de acordo com algum modelo muitas vezes heurístico.

Um modelo para sistemas desordenados comumente utilizado é o descrito pelo seguinte Hamiltoniano *tight-binding* (modelo de ligações fortes), considerando apenas um orbital s por sítio:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{(i,j)} V_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (2.1)$$

$$\langle i|j\rangle = \delta_{(i,j)} \quad (2.2)$$

Aqui, 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 . 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* (descrevendo o acoplamento efetivo entre os átomos que constituem a rede). No presente trabalho serão consideradas apenas somas sobre sítios (i, j) primeiros vizinhos.

A desordem pode ser 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.

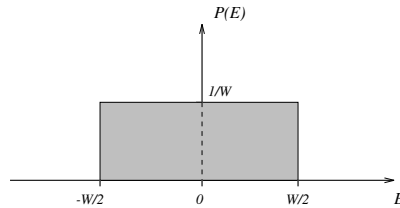
Discutiremos a seguir os dois modelos de desordem que estudamos neste trabalho.

2.2 Modelos de Desordem

2.2.1 Desordem tipo ruído branco

A forma mais largamente utilizada para se introduzir a desordem no Hamiltoniano (2.1) é a empregada no Modelo de Anderson, onde as energias ϵ_i consideradas são aleatórias e não correlacionadas. Assume-se uma distribuição uniforme de energias no intervalo entre $-W/2$ e $W/2$, ou seja, a distribuição $P(\epsilon_i)$ tem a forma:

$$P(\epsilon_i) = \begin{cases} 1/W, & |\epsilon_i| < W/2 \\ 0, & |\epsilon_i| > W/2 \end{cases}$$



Desta maneira, 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*, com esta distribuição de energias simulando a desordem na rede, 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 aqui consiste de espalhadores tipo função δ (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 frequentemente associado a este tipo de desordem na literatura.

2.2.2 Desordem Correlacionada

Este outro modelo de desordem com que trabalhamos 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 entre $-W/2$ e $W/2$. 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:

$$\epsilon_i = \frac{1}{\pi\lambda^2} \sum_j \epsilon_j e^{-|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|^2/\lambda^2} \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{R}_i$ é a posição espacial do sítio i ; λ é o comprimento de correlação da desordem e, como mencionamos, $-\frac{W}{2} < \epsilon_j < \frac{W}{2}$.

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 . Na Tabela I a seguir, temos alguns números para exemplificar como varia a contribuição das energias dos demais sítios da rede ao somatório em (2.3), de acordo com a distância do sítio considerado, para três diferentes valores de λ .

Alguns exemplos da forma que assume esse potencial correlacionado, para diferentes comprimentos de correlação, podem ser vistos na Figura (2.1). O primeiro perfil, indicado por $\lambda = 0$ corresponde ao caso de desordem tipo ruído branco. 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.

valor de $e^{- \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j ^2 / \lambda^2}$			
$ R_i - R_j $	$\lambda = a$	$\lambda = 2a$	$\lambda = 3a$
0 (próprio sítio)	1	1	1
a (1 ^{os} vizinhos)	0.37	0.78	0.89
$\sqrt{2}a$ (2 ^{os} vizinhos)	0.13	0.61	0.80
$2a$ (3 ^{os} vizinhos)	0.02	0.37	0.64
:	:	:	:
$4a$ (9 ^{os} vizinhos)	0	0.02	0.17

Tabela I: Valores de $e^{-|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|^2 / \lambda^2}$ para diferentes λ 's. (a é o parâmetro de rede).

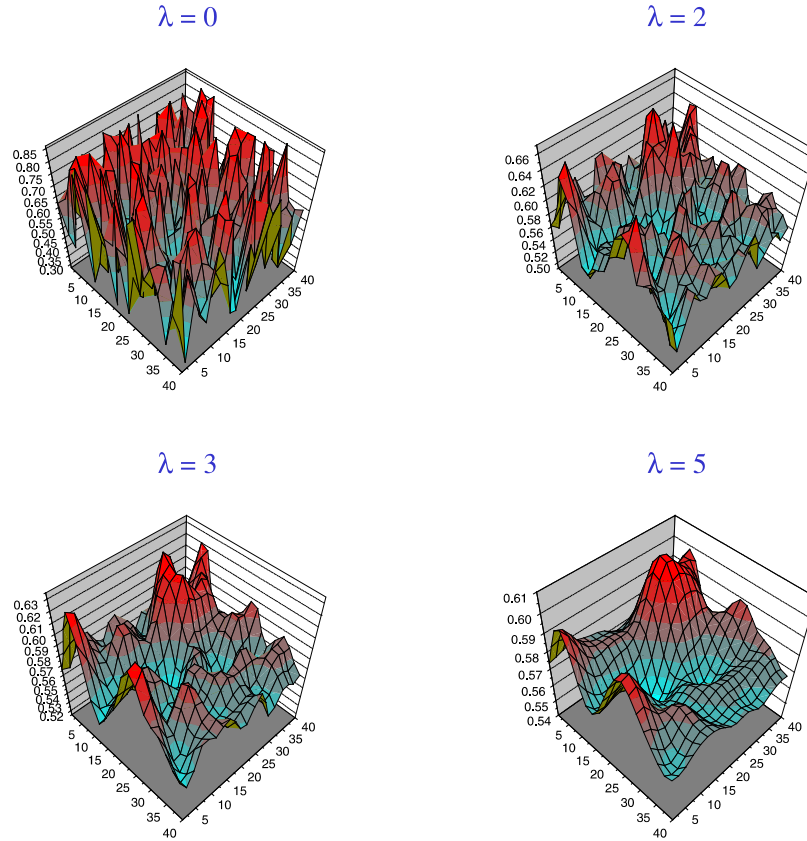


Figura 2.1: Visualização do efeito de correlação no perfil de potencial desordenado gerado numa rede de 40x40 sítios. Comparação entre diferentes comprimentos de correlação λ .

2.3 Inclusão do Campo Magnético

A introdução de um campo magnético uniforme $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ perpendicular ao sistema implica em alterações no termo de *hopping* do Hamiltoniano (2.1) (segundo termo). Como foi mostrado por Peierls [44] e por Luttinger [45], o efeito do campo magnético sobre elétrons num potencial periódico é representado pela inclusão de uma fase complexa no parâmetro de *hopping*:

$$V_{ij}(B) = V_{ij}(0) \exp \left[\frac{ie}{\hbar} \int_i^j \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \right] , \quad (2.4)$$

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 por (2.4), ver por exemplo as referências [46, 47]).

A integral de linha que aparece em (2.4) é sobre uma trajetória qualquer entre os pontos i e j . Quando a integral é sobre um caminho fechado, pelo teorema de Gauss, temos:

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \iint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \Phi , \quad (2.5)$$

onde a integral de superfície representa o fluxo magnético Φ através da área delimitada.

Vejamos como simplificar a expressão (2.4) no caso de nosso interesse, ou seja, no caso em que i e j são coordenadas discretas - sítios de uma rede quadrada bidimensional - com acoplamento apenas entre primeiros vizinhos. Nesse caso, um sítio i da rede tem coordenadas cartesianas $(x, y) = (na, ma)$, onde m e n são números inteiros e a é a constante de rede, como mostra a Figura (2.2).

Primeiramente, determinemos a forma do potencial vetor $\mathbf{A}$. Para representar o campo magnético na direção z , há duas formas convenientes e comumente usadas para o potencial vetor:

$$\mathbf{A} = (0, -Bx, 0) \longrightarrow \text{calibre de Landau (assimétrico)} \quad (2.6)$$

$$\mathbf{A} = \left(\frac{1}{2}By, -\frac{1}{2}Bx, 0\right) \longrightarrow \text{calibre simétrico} \quad (2.7)$$

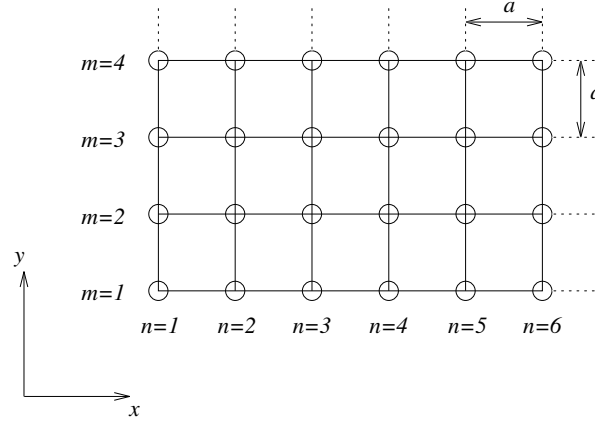


Figura 2.2: Esquema da rede discreta.

Obs: *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. No caso discreto, como vimos, $x = na$. Portanto:

$$\mathbf{A} = (0, -Bna, 0) \quad (2.8)$$

Com essa escolha de calibre, e tomando $V_{ij}(0) = V$, podemos ver facilmente a partir de eq. (2.4) que o *hopping* ao longo da direção $\hat{x}$ da rede será simplesmente: $V_x(B) = V$, pois $\mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} = 0$. Enquanto isso, o *hopping* entre primeiros vizinhos ao longo da direção $\hat{y}$ será dado por:

$$V_y(B) = V e^{\frac{ie}{\hbar} \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{y}} = V e^{\pm \frac{ie}{\hbar} nBa^2} \quad (2.9)$$

onde os sinais $+$ e $-$ correspondem a translações nas direções $-\hat{x}$ e $+\hat{x}$, respectivamente.

Se fizermos,

$$\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{e}{h} Ba^2 \quad (2.10)$$

a Eq. (2.9) torna-se:

$$V_y(B) = V e^{\pm i 2\pi n \phi / \phi_0} \quad (2.11)$$

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). Abaixo, um esquema indicando os *hoppings* com os quatro primeiros vizinhos de um sítio (n, m) qualquer da rede:

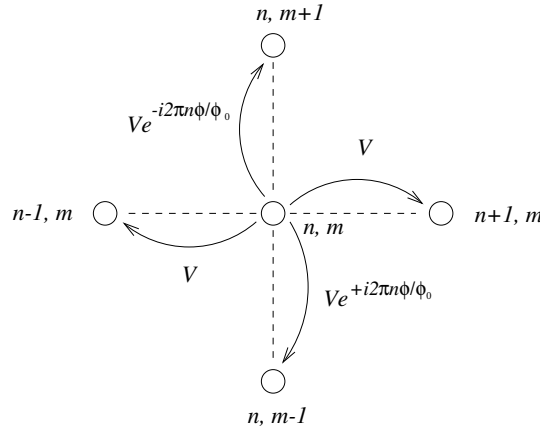


Figura 2.3: *Hoppings* com os 4 primeiros vizinhos, no calibre de Landau

Assim, substituindo a notação $|i\rangle$ por $|n, m\rangle$ para identificar o sítio de uma rede quadrada, o Hamiltoniano (2.1) na presença de campo magnético pode ser reescrito como:

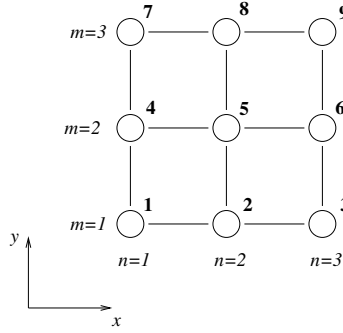
$$H = \sum_{n,m} \epsilon_{n,m} |n, m\rangle \langle n, m| + \sum_{n,m} \left[V e^{-i 2\pi n \phi / \phi_0} |n, m\rangle \langle n, m+1| + V e^{i 2\pi n \phi / \phi_0} |n, m\rangle \langle n, m-1| + V |n, m\rangle \langle n+1, m| + V |n, m\rangle \langle n-1, m| \right] \quad (2.12)$$

Deve-se notar que o *hopping* ao longo da direção $\hat{y}$ será dependente da posição no eixo $\hat{x}$ (dependente de n). Para cada “coluna” de sítios ($\hat{x}$ fixo), o *hopping* na direção $\hat{y}$ é constante. Numa translação para uma outra “coluna”, há uma adição de fase no *hopping* ao longo de $\hat{y}$.

Vale ressaltar que o fato de o Hamiltoniano não ser invariante sob translações é consequência da escolha do calibre de Landau (assimétrico). Num gás de elétrons bidimensional

com campo magnético perpendicularmente aplicado, obviamente há invariância de translação nas direções $\hat{x}$ e $\hat{y}$. Entretanto esta característica do Hamiltoniano no calibre de Landau não altera a descrição do sistema físico (ver discussão sobre esse assunto na referência [47]). Como foi mencionado, todas as quantidades fisicamente observáveis são invariantes à escolha do calibre. Uma das vantagens de se trabalhar com este calibre é a possibilidade de estendermos o tamanho da rede apenas na direção $\hat{x}$ e, com isso, conseguirmos trabalhar com sistemas maiores e/ou fluxos magnéticos menores.

Exemplo: No caso de uma rede 3x3 (9 sítios), ilustrada abaixo, os elementos de matriz $\langle n, m | H | n', m' \rangle$ do Hamiltoniano (2.12) são definidos da seguinte maneira:



$$\begin{pmatrix} \epsilon_1 & V & 0 & Ve^{-i2\pi\frac{\phi}{\phi_0}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ V & \epsilon_2 & V & 0 & Ve^{-i4\pi\frac{\phi}{\phi_0}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V & \epsilon_3 & 0 & 0 & Ve^{-i6\pi\frac{\phi}{\phi_0}} & 0 & 0 & 0 \\ Ve^{i2\pi\frac{\phi}{\phi_0}} & 0 & 0 & \epsilon_4 & V & 0 & Ve^{-i2\pi\frac{\phi}{\phi_0}} & 0 & 0 \\ 0 & Ve^{i4\pi\frac{\phi}{\phi_0}} & 0 & V & \epsilon_5 & V & 0 & Ve^{-i4\pi\frac{\phi}{\phi_0}} & 0 \\ 0 & 0 & Ve^{i6\pi\frac{\phi}{\phi_0}} & 0 & V & \epsilon_6 & 0 & 0 & Ve^{-i6\pi\frac{\phi}{\phi_0}} \\ 0 & 0 & 0 & Ve^{i2\pi\frac{\phi}{\phi_0}} & 0 & 0 & \epsilon_7 & V & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Ve^{i4\pi\frac{\phi}{\phi_0}} & 0 & V & \epsilon_8 & V \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Ve^{i6\pi\frac{\phi}{\phi_0}} & 0 & V & \epsilon_9 \end{pmatrix}$$

Portanto, fica claro neste exemplo que os elementos $\langle n, m | H | n', m' \rangle$ formam uma matriz Hermitiana. Uma vez definidos os elementos de matriz para um dado sorteio dos $\{\epsilon_i\}$, podem

ser calculados os auto-valores e auto-vetores de H [48]. Os auto-valores correspondem aos níveis de energia do sistema e os auto-vetores, às funções de onda do elétron sobre a rede.

2.4 Modelo de Rede X Modelo Contínuo

Como será mostrado mais adiante nesta seção, a conexão entre o modelo de rede *tight-binding*, de que estamos tratando, e o modelo contínuo, no qual as energias dos níveis de Landau são dadas por $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$, é garantida pelas condições a seguir:

i) Que o parâmetro de *hopping* V seja apropriadamente escolhido como:

$$V = -\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \quad (2.13)$$

onde m^* é a massa efetiva do elétron e a é o parâmetro de rede.

ii) Que a energia intrínseca dos sítios, ϵ_0 , seja igual ao negativo do somatório das energias de *hopping* com os primeiros vizinhos:

$$\epsilon_0 = -4V \quad (2.14)$$

Num gás de elétrons bidimensional formado numa heterojunção de GaAs/AlGaAs, os estados eletrônicos são bem descritos dentro da aproximação da massa efetiva (o critério para a validade desta aproximação em heterojunções está discutido em detalhes em [49]). A energia total de um elétron no fundo da banda de condução do GaAs será dada por:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} \quad (2.15)$$

sendo que a massa efetiva do elétron, para este caso, $m^* = 0.067m_e$.

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 [50]. Em particular, na ausência de campo magnético, a equação de Schrödinger para o Hamiltoniano (2.12) do modelo, $H\psi = E\psi$, fornece a conhecida relação de dispersão para uma rede bidimensional quadrada:

$$E_k = \epsilon_0 + 2V \cos(k_x a) + 2V \cos(k_y a) \quad (2.16)$$

Para pequenos vetores de onda (isto é, para pequenos espaçamentos de rede no presente modelo), o cosseno é uma aproximação muito boa para a relação de dispersão parabólica (2.15) como está ilustrado na Figura (2.4) a seguir.

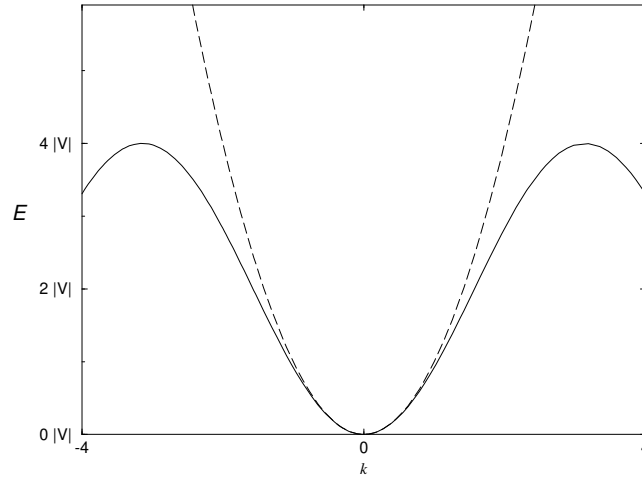


Figura 2.4: Relações de dispersão (ou “bandas de energia”): a linha cheia corresponde à forma de cosseno do caso discreto e a linha tracejada corresponde à dispersão parabólica do modelo contínuo. Observa-se convergência no limite de $E \leq |V|$.

Para justificarmos as duas condições mencionadas no início desta seção, lembramos que, para $(k_x a)$ e $(k_y a)$ pequenos, podemos escrever,

$$\cos(k_x a) \approx 1 - \frac{k_x^2 a^2}{2} \quad ; \quad \cos(k_y a) \approx 1 - \frac{k_y^2 a^2}{2}$$

Substituindo em (2.16), temos:

$$\begin{aligned} E_k &\approx \epsilon_0 + 2V - V a^2 k_x^2 + 2V - V a^2 k_y^2 \\ &= \epsilon_0 + 4V - V a^2 (k_x^2 + k_y^2) \\ &= \epsilon_0 + 4V - V a^2 \vec{k}^2 \end{aligned} \quad (2.17)$$

Portanto vemos aqui que se fizermos

$$V = -\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \quad \text{e} \quad \epsilon_0 = -4V \quad ,$$

que são exatamente as condições (2.13) e (2.14) respectivamente, teremos:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*}$$

ou seja, teremos a equivalência entre o modelo *tight-binding* e o modelo contínuo no limite mencionado. Esse limite corresponde aproximadamente ao intervalo $E(k) \leq |V|$.

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.

Como acabamos de discutir, 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 considerar os limites da capacidade computacional.

2.5 Espectros de Energia

2.5.1 Borboleta de Hofstadter

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. (2.12). A equação de Schrödinger, $H\psi = E\psi$, para a função de onda bidimensional $\psi(n, m)$ pode ser escrita na seguinte forma:

$$Ve^{-i2\pi n\phi/\phi_0}\psi(n, m+1) + Ve^{i2\pi n\phi/\phi_0}\psi(n, m-1) + V\psi(n+1, m) + V\psi(n-1, m) + \epsilon_{n,m}\psi(n, m) = E\psi(n, m) \quad (2.18)$$

Os coeficientes devidos ao fluxo magnético na Eq. (2.18) 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,

$$\psi(n, m) = e^{i\nu m}\varphi(n) \quad (2.19)$$

Assim, sem levar em conta os efeitos de desordem, ou seja, fazendo $\epsilon_{n,m} = \text{constante}$ (pode-se escolher arbitrariamente $\epsilon_{n,m} \equiv 0$) e tomando $V = 1$, obtém-se a partir de (2.18) a conhecida equação de Harper [51]:

$$\varphi(n+1) + \varphi(n-1) + 2\cos(2\pi n\phi/\phi_0 - \nu)\varphi(n) = E\varphi(n) \quad (2.20)$$

Inspecionando a estrutura de bandas da equação de Harper em função de ϕ/ϕ_0 , Hofstadter mostrou pela primeira vez em 1976 [52], através de seu trabalho numérico, as ricas características espectrais exibidas por este modelo. O resultado gráfico, mostrado na Figura (2.5), é hoje conhecido como borboleta de Hofstadter.

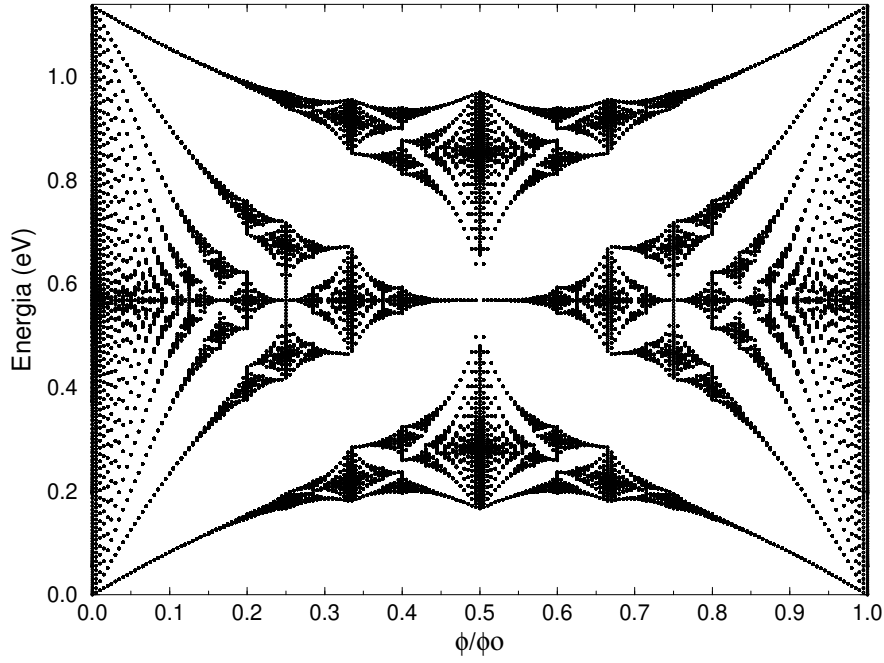


Figura 2.5: Espectro completo de energia em função do fluxo magnético, que obtivemos com o modelo descrito aplicado a uma rede sem desordem.

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

$$\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{p}{q}, \quad (2.21)$$

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* (exceto quando q é par, pois para q par, as duas bandas do centro do espectro apresentam *gap* nulo entre elas). O espectro é simétrico em relação ao zero de energia (centro da banda). É também periódico com respeito ao fluxo magnético, com período 1, sendo portanto simétrico em relação a $\phi/\phi_0 = 0.5$.

2.5.2 Limite Contínuo dos Espectros

Vemos no espectro da Figura (2.5) que, no limite de baixos campos (fluxos) magnéticos, a estrutura eletrônica do sistema periódico é descrita pelo feixe de níveis de Landau $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$. Esse é o chamado limite contínuo no qual estamos interessados neste trabalho.

Os níveis de Landau fortemente degenerados começam a se desdobrar a partir do valor de fluxo para o qual o comprimento magnético é da ordem do parâmetro de rede, $l_B \leq a$.

Nesse contexto é necessário definir os limites de validade do modelo de rede para emular um sistema contínuo, do ponto de vista numérico.

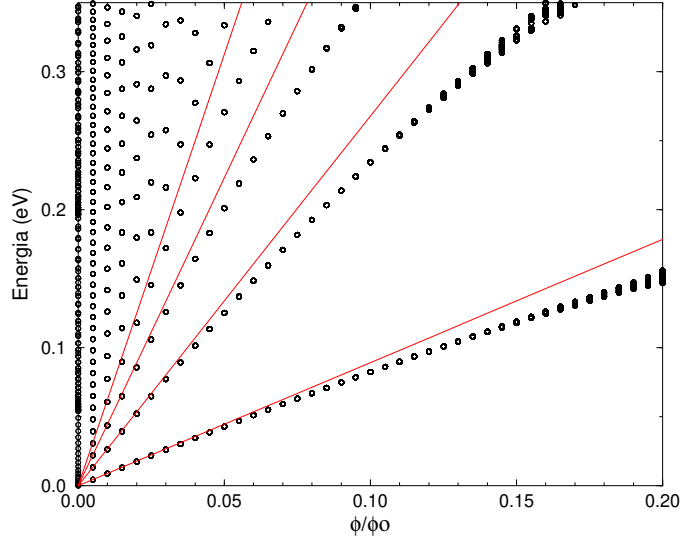


Figura 2.6: Comparação das energias dos níveis de Landau do modelo contínuo (linhas vermelhas) com as energias dos estados da região de baixos fluxos do espectro de Hofstadter.

A Figura (2.6) reproduz parte do espectro de Hofstadter mostrado anteriormente, no intervalo de pequenos fluxos magnéticos. Sobrepostos ao espectro (em vermelho) estão os níveis de Landau correspondentes. Os parâmetros *tight-binding* V e ϵ_0 foram ajustados para uma massa efetiva $m^* = 0.067m_e$ (fundo da banda de condução do GaAs), utilizando as expressões (2.13) e (2.14) e definindo um parâmetro de rede $a = 20\text{\AA}$. Esses são os parâmetros usados ao longo de todo o trabalho.

Vemos, pela análise da Figura (2.6), que o modelo de rede emula o primeiro nível de Landau para $\phi/\phi_0 \leq 0.1$. Os próximos três níveis também são bem descritos para $\phi/\phi_0 \leq 0.05$. É interessante notar que com os parâmetros utilizados, o comprimento magnético será igual ao parâmetro de rede ($a = 20\text{\AA}$) para $\phi/\phi_0 = 0.16$. Na tabela estão alguns valores do comprimento magnético correspondentes a diferentes fluxos magnéticos. Os valores são

obtidos a partir de:

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \quad e \quad \frac{\phi}{\phi_0} = \frac{e}{h} B a^2$$

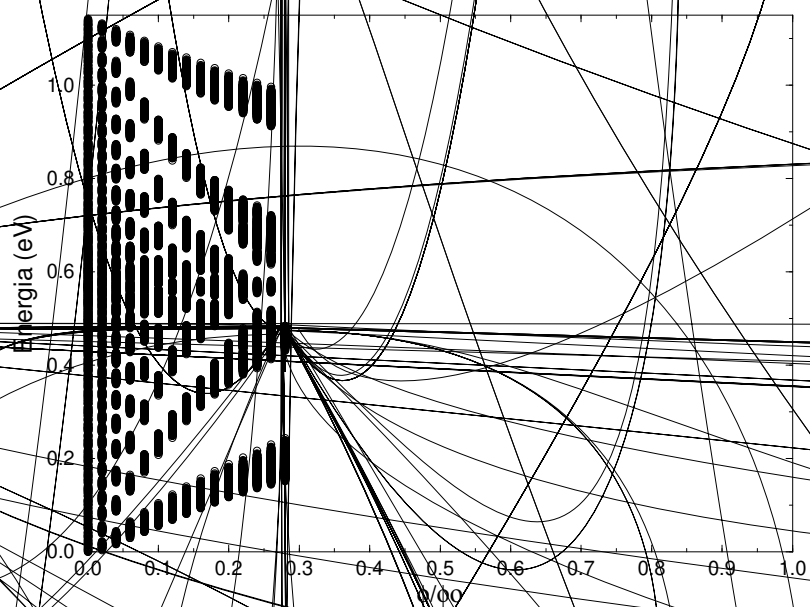
ϕ/ϕ_0	B	l_B
0.01	10.3 T	80 Å
0.025	25.8 T	50.5 Å
0.05	51.7 T	35.7 Å
0.1	103 T	25.2 Å
0.15	155 T	20.6 Å
0.2	207 T	17.8 Å

Tabela II: Valores do comprimento magnético (l_B) e do campo magnético (B), correspondentes a diferentes fluxos magnéticos.

2.5.3 Espectro na Presença de Desordem

Os espectros anteriormente mostrados correspondem, como discutido, ao caso ordenado, ou seja, em que não foi considerada nenhuma desordem no sistema. A presença de desordem modifica o espectro, provocando o alargamento dos níveis de energia, que passam a formar bandas. Quanto maior a desordem considerada, maior o alargamento em energia destas bandas.

Esse efeito da desordem sobre o espectro de energias pode ser visto na Figura (2.7). Nesse caso, foi considerada uma rede com 50x50 sítios e a desordem é do tipo ruído branco (ou seja, sem correlação) com $W/V=0.8$. Nota-se, quando comparamos com o espectro da Figura (2.5), que todos os níveis de energia sofrem de fato um alargamento e em particular, na região de baixos fluxos magnéticos que apresentava níveis de energia degenerados (correspondendo aos níveis de Landau), a degenerescência é quebrada, dando origem às chamadas bandas de Landau. A forma da densidade de estados será mostrada mais adiante, nos capítulos de resultados.



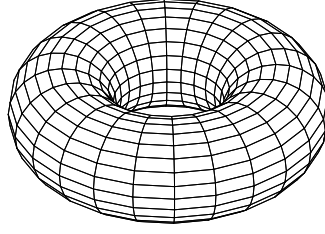


Figura 2.8: Toróide - geometria da rede com condições de contorno periódicas.

$x = na$ - ver Eq. (2.11)). 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 $x = (n + N_x)a$:

$$V e^{i2\pi n\phi/\phi_0} = V e^{i2\pi(n+N_x)\phi/\phi_0}$$

ou seja,

$$e^{i2\pi N_x\phi/\phi_0} = 1$$

Portanto,

$$N_x \frac{\phi}{\phi_0} = \text{inteiro} \quad (2.22)$$

Assim, há limitações nos valores de fluxo magnético ϕ/ϕ_0 que podem ser considerados. Os fluxos possíveis (que satisfazem à condição (2.22)) são portanto:

$$\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{1}{N_x}, \frac{2}{N_x}, \frac{3}{N_x}, \frac{4}{N_x}, \dots \quad (2.23)$$

Ressaltamos que neste trabalho estamos interessados no limite de baixos campos magnéticos. Vale portanto frizar que o menor fluxo magnético com que se pode trabalhar neste modelo é $1/N_x$. Consequentemente, para reduzir o fluxo é necessário aumentar o tamanho da rede (pe-lo menos na direção $\hat{x}$) e isto implica em aumento do tamanho da matriz a ser diagonalizada (aumento do custo computacional).

2.6 Razão de Participação

Há diversas formas de se calcular o grau de localização de um estado eletrônico, como por exemplo: método de funções de Green recursivas, matrizes de transferência, cálculo do comprimento de localização [8, 54].

A forma que adotamos neste trabalho para aferir o grau de localização dos estados eletrônicos foi através da Razão de Participação, conceito introduzido em 1970 por Bell e Dean [55].

Num modelo *tight-binding* com N sítios, a Razão de Participação (RP) é definida por (ver também referências [56, 57]):

$$RP = 1/(N \sum_{i=1}^N |a_i|^4) \quad (2.24)$$

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 melhor compreendido se ilustrarmos dois casos limites:

- 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: $RP = 1$.
- 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) 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. Thouless [56] considera que se tivermos, por exemplo, um plano de nós na função de onda sobre a rede bidimensional, com amplitude $\cos(k_1x)$, então teremos $RP = 2/3$; se tivermos dois planos de nós, com amplitudes tipo $\cos(k_1x)\cos(k_2y)$, então $RP = 4/9$.

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 .

Capítulo 3

Resultados I :

Desordem tipo Ruído Branco

A desordem tipo ruído branco, conforme discutido na seção 2.2.1, corresponde à forma de inserir a desordem adotada no modelo de Anderson, onde a energia de cada sítio tem um valor aleatório, distribuído num intervalo $[-W/2, +W/2]$, e não-correlacionado com as energias dos demais sítios da rede.

Apresentaremos neste capítulo os resultados obtidos com este modelo de desordem. Será discutida primeiramente a forma da densidade de estados do sistema e depois então serão apresentados os cálculos de grau de localização dos estados (através da Razão de Participação), evidenciando o mecanismo de levitação de estados estendidos.

3.1 Densidade de Estados

Na seção 2.5.2, foi discutido que para pequenos valores de fluxo magnético ($\phi/\phi_0 \leq 0.1$) o modelo numérico que utilizamos emula bem o limite contínuo, sendo que os níveis de energia correspondem aos níveis de Landau. Comentou-se ainda, nas seções (1.1.3) e (2.5.3), que a presença de desordem provoca o alargamento dos níveis de Landau, de forma que a densidade de estados do sistema passa a ser definida por bandas.

Um exemplo da forma da densidade de estados que se obtém para o sistema descrito, para um fluxo magnético $\phi/\phi_0 = 0.05$, pode ser visto na Figura (3.1). 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 (como foi comentado anteriormente, a densidade de estados é simétrica em relação ao centro do espectro). A desordem, nesse caso, foi considerada $W/V = 0.8$. A densidade de estados é obtida através da construção de histogramas das posições em energia dos estados eletrônicos, levando-se em conta 100 diferentes realizações do potencial desordenado.

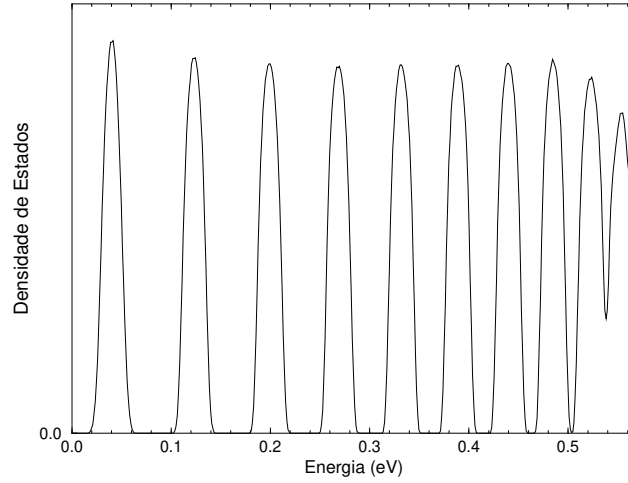


Figura 3.1: Densidade de Estados até o centro da banda, para um sistema com $W/V = 0.8$ e $\phi/\phi_0 = 0.05$.

Todas as bandas têm o mesmo número de estados eletrônicos e, como pode ser observado na Figura (3.1), todas apresentam o mesmo alargamento em energia devido à desordem. Observa-se ainda que o espaçamento entre uma banda e outra vai sendo ligeiramente reduzido com o aumento da energia e isso é uma consequência do modelo de rede considerado, como discutido na seção 2.5.2 (no modelo contínuo as bandas de Landau são igualmente espaçadas). Todavia, ressalta-se o fato de que as bandas estão bem definidas, podendo ser claramente distinguidas umas das outras.

Para vermos em mais detalhes o efeito da desordem sobre a Densidade de Estados do sistema, na Figura (3.2) foram focalizadas as quatro primeiras bandas de Landau, para sistemas submetidos todos ao mesmo fluxo magnético $\phi/\phi_0 = 0.05$, porém para diferentes amplitudes de flutuação da desordem (indicadas pela razão W/V).

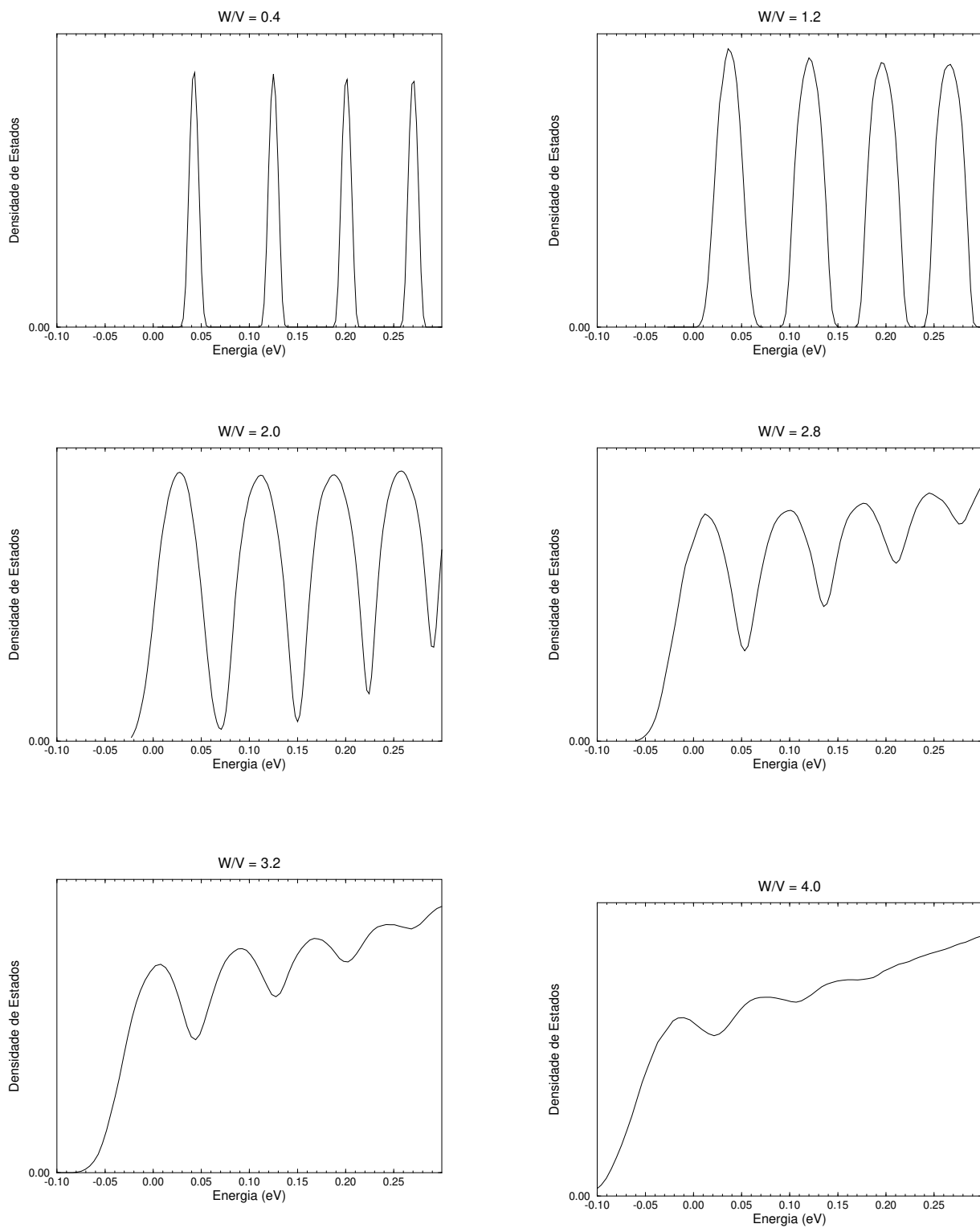


Figura 3.2: Evolução da Densidade de Estados com o aumento da desordem (W/V) no sistema. Fluxo magnético $\phi/\phi_0 = 0.05$.

Na ausência de desordem ($W/V = 0$), a densidade de estados consiste de níveis de energia bem definidos e degenerados. Conforme a desordem é aumentada, observa-se um alargamento gradativo destes níveis, formando bandas de energia, até que, a partir de $W/V \approx 2.0$, este alargamento começa a ser da ordem de $\hbar\omega_c$ (ou seja, da ordem do espaçamento entre as bandas) e portanto começa a haver superposição entre as bandas. Nota-se ainda que, como o espaçamento entre elas não é exatamente constante neste modelo, as bandas na região de mais alta energia, que estão ligeiramente mais próximas umas das outras, “desaparecem” antes com o aumento da desordem, pois sofrem superposição a desordens relativamente menores.

Outro ponto importante que deve ser notado é que além de tornarem-se mais largas com a desordem, as bandas também deslocam-se para mais baixas energias (notar que na Figura (3.2) a escala em energia é a mesma para todos os 6 gráficos mostrados). Para ver isso com mais clareza, as Densidades de Estados para diferentes desordens estão mostradas normalizadas e superpostas na Figura (3.3). Nitidamente as bandas como um todo “afundam” em energia, o que pode ser percebido mais claramente pelo deslocamento da posição do máximo das bandas.

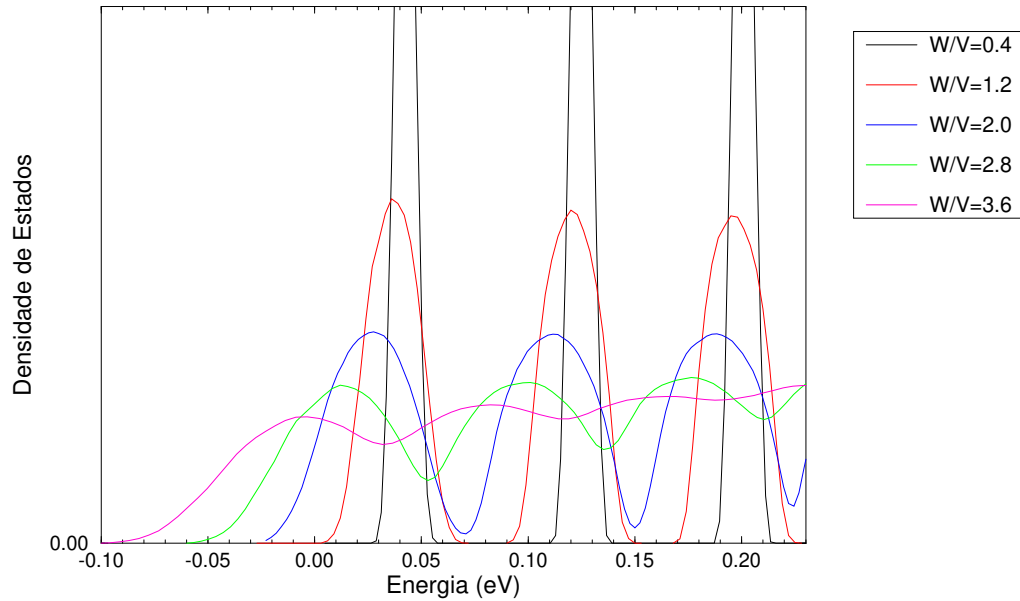


Figura 3.3: Densidades de Estados (normalizadas) para diferentes desordens. $\phi/\phi_0 = 0.05$.

Este deslocamento das bandas para mais baixas energias é devido ao efeito quântico de repulsão entre os níveis, como discutido por T. Ando [58] e por Haldane e Yang [42].

Observamos, como mostra a Figura (3.4), que a largura das bandas (Γ), determinada a meia altura, varia linearmente com a amplitude W de flutuação da desordem (isso pelo menos até $W/V = 2.0$, ou seja, até o limite onde as bandas começam a se superpor). As larguras foram determinadas para a primeira banda de Landau de cada um dos diferentes valores de desordem (todavia, neste modelo observamos que o alargamento não depende do índice da banda). Para este valor de fluxo ($\phi/\phi_0 = 0.05$), a relação entre Γ e W/V , obtida pelo ajuste dos pontos do gráfico, é dada por:

$$\Gamma = 0.0251 \frac{W}{V} \quad (3.1)$$

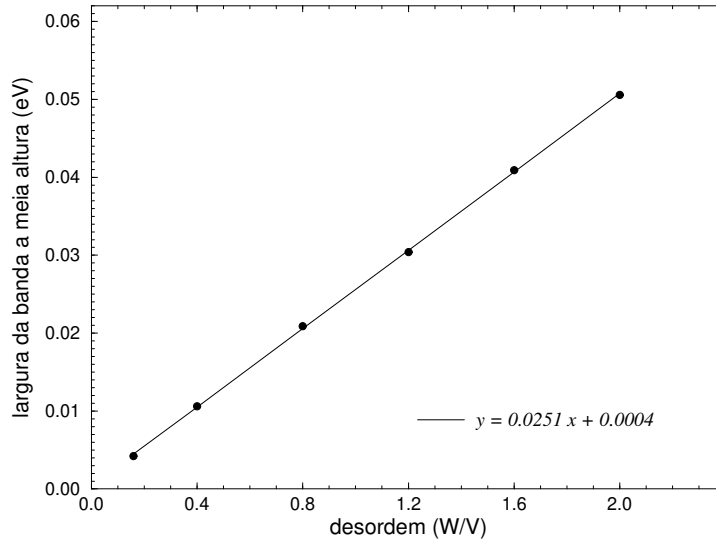


Figura 3.4: Largura a meia altura da primeira banda de Landau em função da desordem. $\phi/\phi_0 = 0.05$.

Esta dependência linear do alargamento Γ das bandas com W está de acordo com a previsão feita por Ando e Uemura [59]. Eles encontraram, para o caso de potenciais espalhadores de curto alcance, a seguinte expressão para Γ :

$$\Gamma = \sqrt{\frac{2}{\pi} \frac{\hbar^2 \omega_c}{\tau}} \quad (3.2)$$

sendo τ o tempo de relaxação. Assim, como $\tau \propto 1/W^2$, a equação (3.2) prevê $\Gamma \propto W$, como o resultado que obtivemos.

Em outra análise feita, a desordem foi mantida constante, enquanto variou-se o fluxo magnético no sistema. Na Figura (3.5), mostramos a dependência da largura das bandas com o fluxo, para uma desordem $W/V = 2.0$.

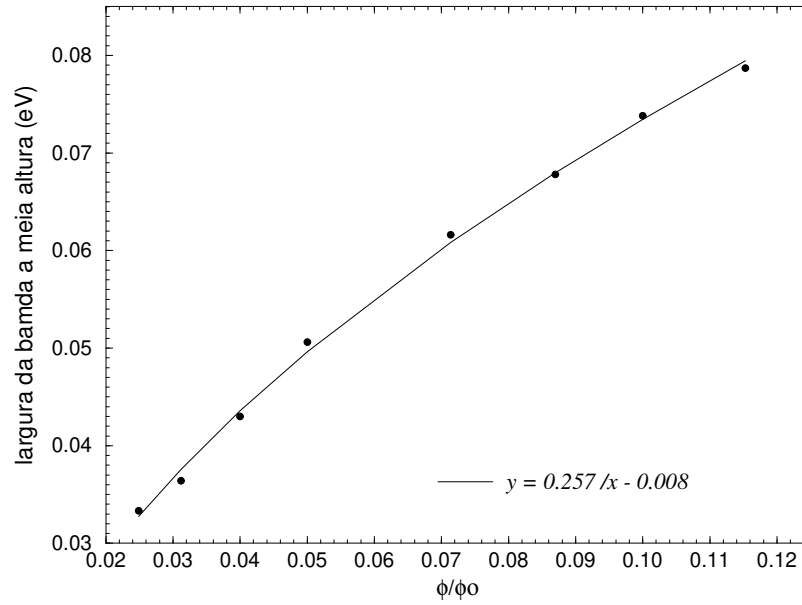


Figura 3.5: Largura a meia altura da primeira banda de Landau em função do fluxo magnético (ϕ/ϕ_0). $W/V = 2.0$.

Encontramos uma dependência da largura Γ com a raiz do campo (ou fluxo) magnético, que para este valor de desordem ($W/V = 2.0$) é dada por:

$$\Gamma = 0.257\sqrt{\phi/\phi_0} - 0.008 \quad (3.3)$$

Este resultado também está de acordo com a previsão da equação (3.2) de Ando e Uemura [59]. Além disso, resultados experimentais [60] também determinaram alargamentos proporcionais a $\sqrt{B}$ no regime de baixos campos magnéticos.

3.2 Localização dos Estados: cálculo da Razão de Participação

O grau de localização dos estados foi calculado através da Razão de Participação (RP), quantidade que descreve a proporção do número total de sítios do sistema que contribuem efetivamente para a função de onda eletrônica (conforme foi discutido na seção 2.6). Portanto, quanto menor a RP de um estado, mais localizado é este estado.

Um exemplo do cálculo da Razão de Participação pode ser visto na Figura (3.6) a seguir, juntamente com a densidade de estados do sistema. 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 estes parâmetros (tamanho de rede e fluxo), cada banda é composta por 80 estados. A RP de cada estado foi então calculada, e está representada pelos círculos em vermelho. O cálculo da RP mostrado neste exemplo, assim como em todos os demais resultados que serão apresentados, corresponde a uma média sobre 100 diferentes realizações do potencial desordenado.

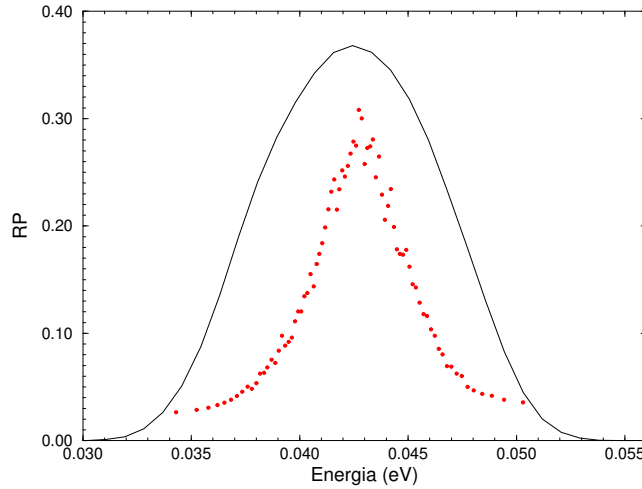


Figura 3.6: Disposição de estados estendidos e localizados na primeira banda de Landau, observada através do cálculo da Razão de Participação (círculos vermelhos). Em preto, a densidade de estados do sistema. Rede com 40×40 sítios, $\phi/\phi_0 = 0.05$ e $W/V = 0.4$.

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

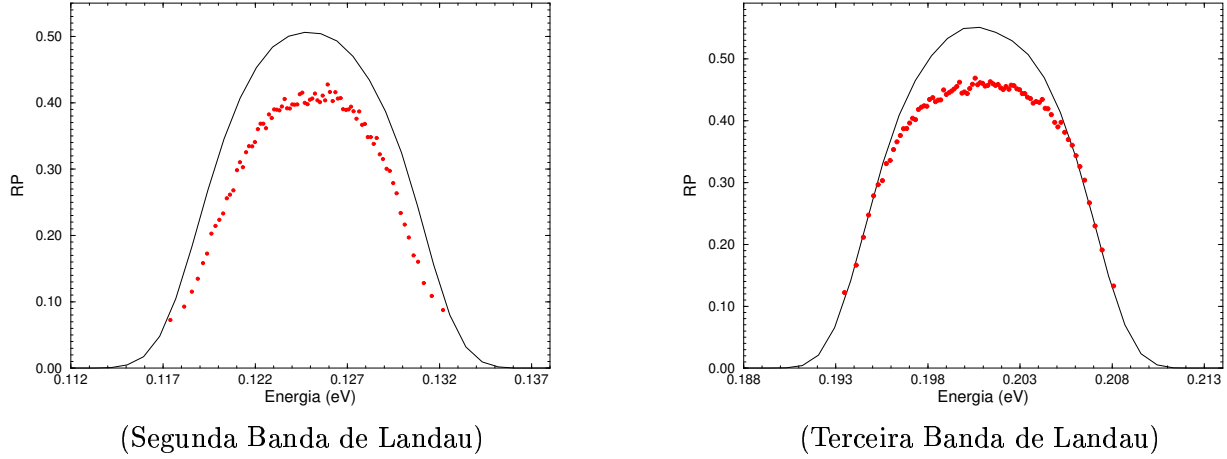


Figura 3.7: Diferenças observadas na RP (círculos vermelhos) da segunda e terceira bandas de Landau, em relação à primeira. Em preto, a densidade de estados. Rede com 40×40 sítios, $\phi/\phi_0 = 0.05$ e $W/V = 0.4$.

Figura (1.6-c)). E conforme se afastam do centro, tendendo aos extremos da banda, os estados mostram-se cada vez mais localizados.

Entretanto, o cálculo da RP dos estados das demais bandas mostra diferenças significativas em relação à primeira banda. A Figura (3.7) mostra a Razão de Participação dos estados da segunda e da terceira bandas de Landau, correspondendo ao mesmo sistema para o qual a primeira banda foi mostrada na Figura (3.6).

Nota-se que, para estas bandas, a RP apresenta um perfil mais suave, não mais apresentando a formação de um pico, ou seja, de uma divergência bem definida, como no caso da primeira banda. Em particular, ainda se podem notar alguns estados mais localizados nos extremos das bandas, mas os estados como um todo mostram-se menos localizados quanto maior o índice da banda de Landau. De fato, é previsto que o comprimento de localização dos estados cresça com o aumento do índice da banda. Para uma discussão sobre esse assunto, ver por exemplo o artigo de revisão de Bodo Huckestein [54], que faz a seguinte estimativa para a dependência do comprimento de localização ξ com o índice N da banda:

$$\xi(N) = l_B \exp[(2N + 1)^2] \quad (3.4)$$

sendo l_B o comprimento magnético. Por esta estimativa temos que $\xi(N = 0) = 2.7l_B$ en-

quanto que $\xi(N = 1) = 8100 l_B$. Ou seja, o comprimento de localização dos estados da segunda banda seria mais de três ordens de grandeza maior do que para a primeira banda. Trabalhamos com redes de 40x40 ou 60x60 sítios, com espaçamento de rede $a = 20\text{\AA}$. Ou seja, sistemas de dimensão lateral entre 800 e 1200\AA. Para um fluxo $\phi/\phi_0 = 0.05$, como o considerado nestes exemplos anteriores, temos $l_B = 35.7\text{\AA}$ (ver Tabela II). Desse modo, os comprimentos de localização para as demais bandas além da primeira, seriam bem maiores que a dimensão do sistema (segundo a equação (3.4)) e portanto os efeitos de localização não poderiam mesmo ser observados. Num artigo mais recente, Bodo Huckestein [43] chama novamente a atenção para este tipo de efeito de tamanho, tanto para o caso das simulações numéricas, como também para o caso experimental, uma vez que os comprimentos de localização para bandas além da primeira podem vir a ser macroscópicos para baixos campos magnéticos (da ordem de poucos tesla).

Com isso, estaremos concentrando nossas análises (para este modelo de desordem) na primeira banda de Landau. Concluindo o raciocínio anterior, as demais bandas também apresentariam divergências na RP, como a observada na primeira banda, se conseguíssemos trabalhar com sistemas muito maiores, de dimensões maiores que seu comprimento de localização.

3.3 Variando a desordem

3.3.1 Evidências da levitação

A fim de procurar evidências de possíveis deslocamentos da posição dos estados estendidos em relação ao centro das bandas de Landau (levitação), variamos o grau de desordem e também o fluxo magnético considerados, sob uma vasta gama de valores. Discutiremos primeiramente nesta seção 3.3 as análises feitas para variação de desordem.

Na Figura (3.8) mostramos o cálculo da Razão de Participação para as quatro primeiras bandas de Landau, para 6 diferentes valores de desordem: desde o caso em que as bandas estão bem separadas até o caso em que a superposição é grande.

O interessante é que, pelo menos para a primeira banda, conseguimos verificar com clareza o processo de levitação de estados estendidos. O pico da RP, conforme a desordem aumenta, deixa de estar posicionado no centro da banda, deslocando-se no sentido de mais

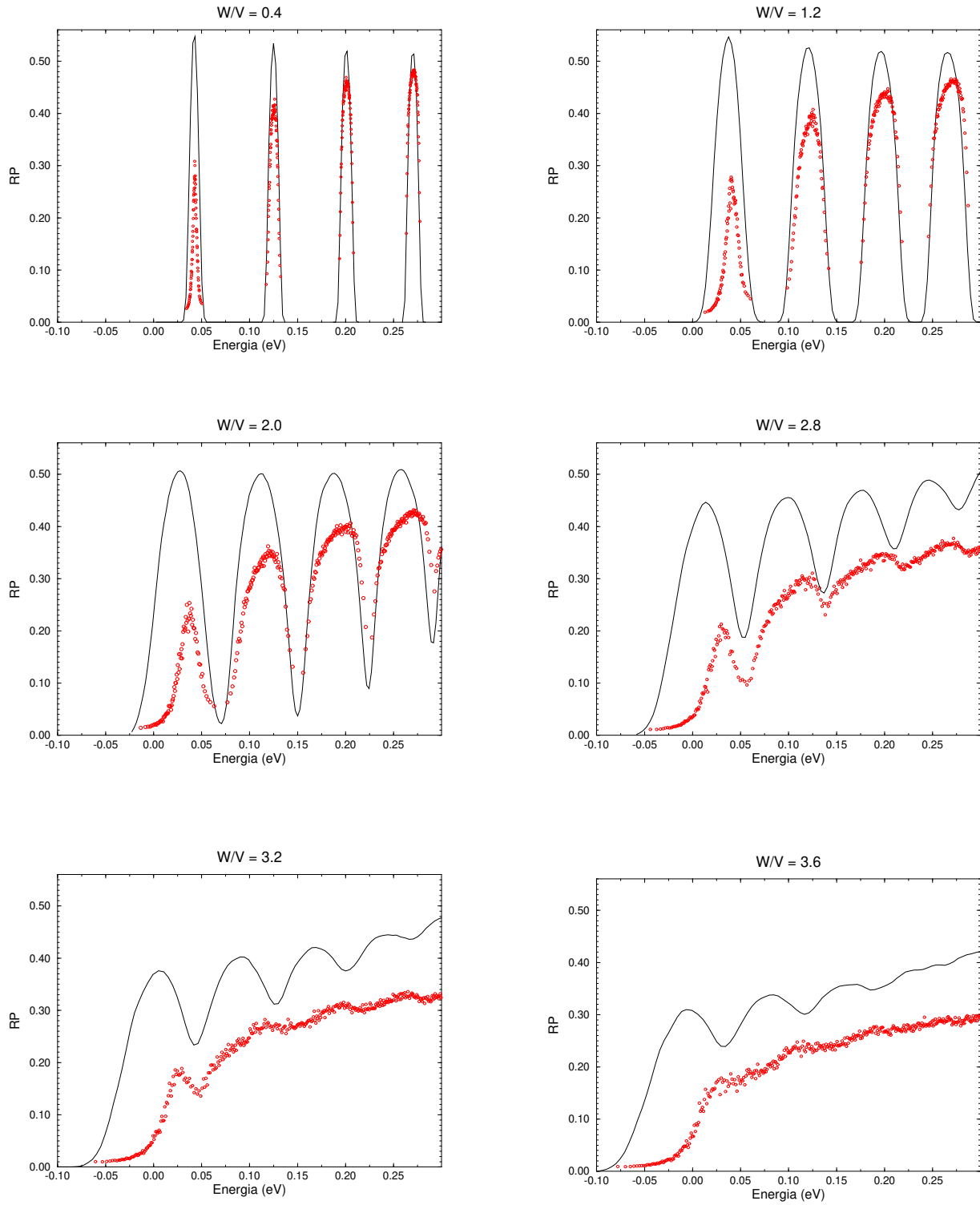


Figura 3.8: Evolução da Razão de Participação (círculos vermelhos) e da Densidade de Estados (linha preta) com o aumento da desordem (W/V) no sistema. $\phi/\phi_0 = 0.05$.

altas energias.

Para permitir a observação dessa levitação dos estados estendidos com mais facilidade, na Figura (3.9) colocamos em destaque a primeira banda de Landau (dos mesmos sistemas mostrados na Figura anterior), traçando uma linha pontilhada na posição aproximada em energia na qual ocorre a divergência na RP. É importante observar que agora as escalas de energia são diferentes, enquanto na Figura (3.8) todos os gráficos, para diferentes valores de desordem, estão na mesma escala.

O deslocamento dos estados estendidos para o lado das mais altas energias é indiscutivelmente identificado, comportamento este qualitativamente de acordo com as previsões de Laughlin [11] e Khmelnitskii [12].

Para desordem igual ou maior que $W/V=3.6$ a posição do estado estendido não pode mais ser definida, pois perdeu-se a definição do pico na RP (como pode ser visto na Figura (3.8)). A partir desta desordem pode-se perceber apenas um limiar localização/delocalização na primeira banda. Ressaltamos que é preciso cuidado ao analisar este resultado, pois mais uma vez podem estar presentes efeitos de tamanho do sistema.

Até os valores de desordem onde conseguimos definir a posição dos estados estendidos, notamos que eles ainda não ultrapassaram os limites da primeira banda. Não há nenhuma evidência de que os estados estendidos da primeira banda encontrem os estendidos da segunda banda, fundindo-se com estes, como propõem alguns autores [17, 23, 28, 36].

A evolução dos estados estendidos da segunda banda não está analisada, mas vale observar que as curvas da RP para a segunda banda também parecem ter o máximo deslocado para mais altas energias. Isso pode ser observado na Figura (3.8), em particular para a desordem $W/V=2.8$.

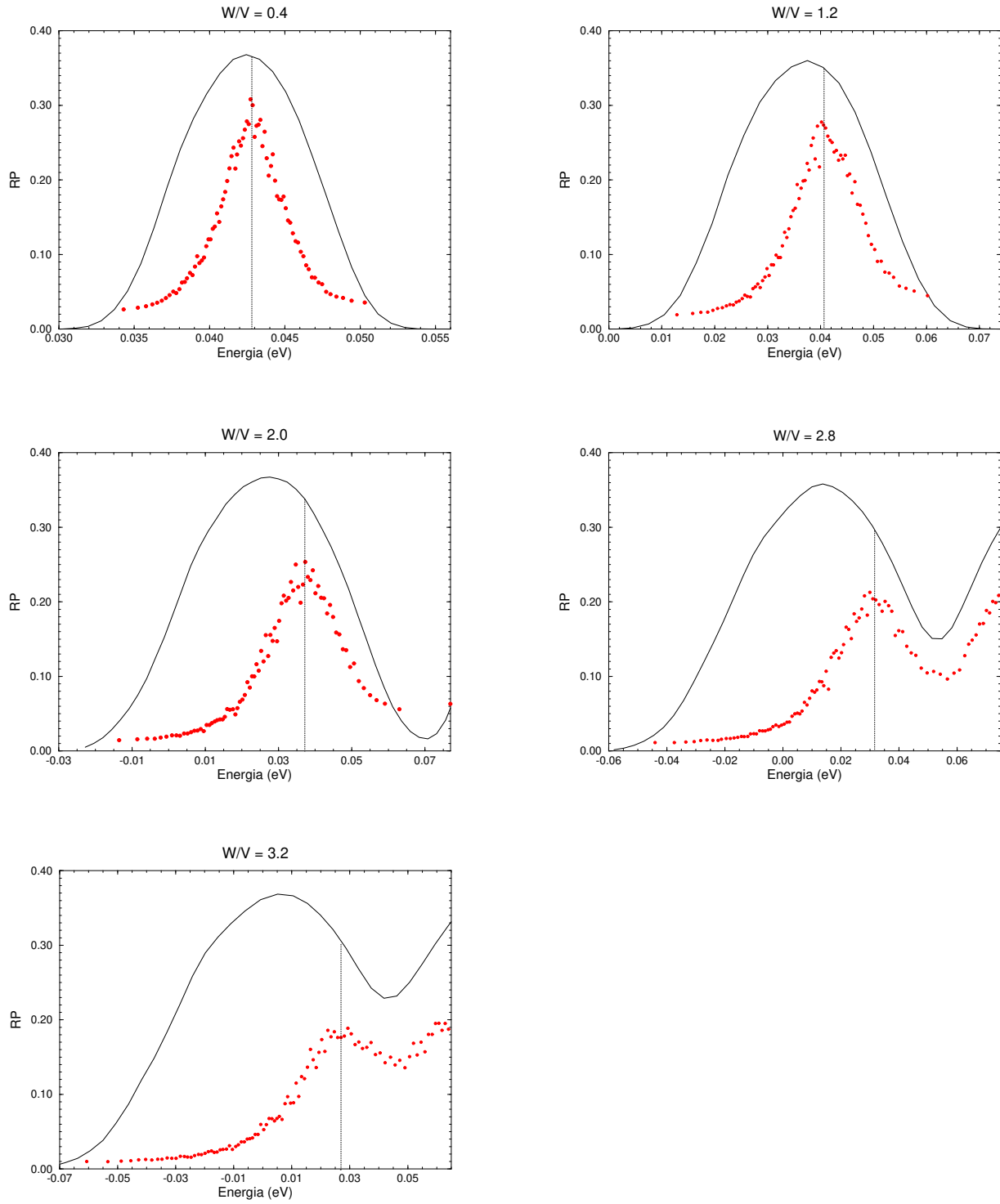


Figura 3.9: Posição dos estados estendidos (indicada pela linha pontilhada), em relação à Densidade de Estados da primeira banda de Landau. Observa-se, com o aumento da desordem, um deslocamento no sentido das mais altas energias. $\phi/\phi_0 = 0.05$.

3.3.2 Quantificando a levitação pelo desvio $\delta E/E$

Uma forma de resumir num único gráfico os resultados de levitação observados nas Figuras (3.8) e (3.9) está indicada na Figura (3.10). Mostra-se a evolução da posição em energia do máximo da densidade de estados (DES) e do pico da Razão de Participação com a desordem crescente, para as duas primeiras bandas. O pico da RP é acompanhado apenas para a primeira banda, onde a divergência é bem definida. Estes valores em energia estão comparados às energias dos níveis de Landau previstas pelo modelo contínuo, para as duas primeiras bandas.

Dessa forma é possível visualizarmos com bastante clareza o comportamento da levitação. Conforme a desordem aumenta, as bandas deslocam-se para mais baixas energias. Os estados estendidos não acompanham todo esse deslocamento para baixo, apresentando um deslocamento menor, menos pronunciado. Assim, observa-se uma levitação relativa dos estados estendidos.

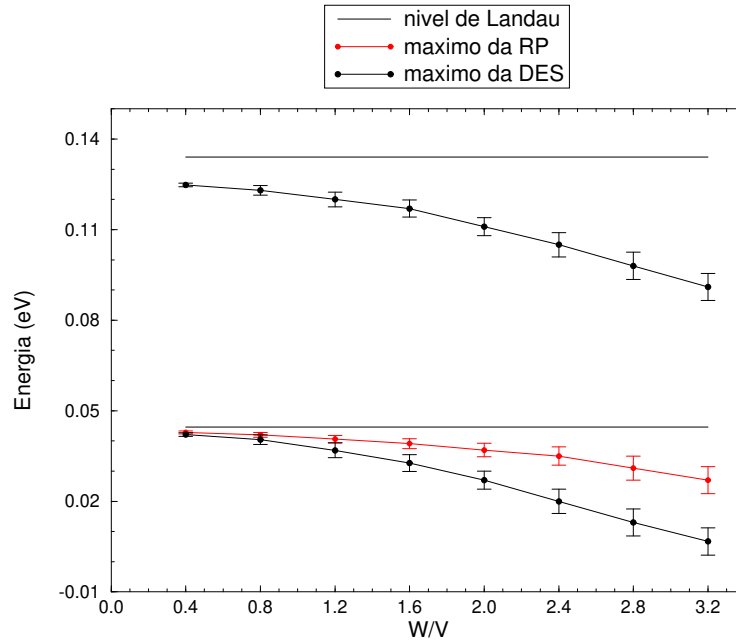


Figura 3.10: Posição em energia do máximo da DES e do máximo (pico) da RP em função da desordem. Observa-se uma levitação relativa.

Vale notar que diversos trabalhos numéricos [29, 31, 32], acompanhando apenas a evolução dos estados delocalizados, sem fazer a comparação destes com a densidade de estados, fizeram interpretações equivocadas, concluindo não haver levitação nestes sistemas.

Para quantificar o resultado de levitação que observamos, calculamos então a diferença em energia, δE , entre o máximo da RP (energia do estado estendido) e o máximo da Densidade de Estados, para cada um dos diferentes valores de desordem. Parametrizamos os valores obtidos, dividindo-os pela energia E , correspondente à separação em energia entre as bandas ($E = \hbar\omega_c$). Ou seja, calculamos:

$$\frac{\delta E}{E} = \frac{E(\text{máx. RP}) - E(\text{máx. DES})}{\hbar\omega_c} \quad (3.5)$$

O resultado obtido está na Figura (3.11) a seguir. Ajustando os pontos da curva, obtivemos a seguinte dependência:

$$\frac{\delta E}{\hbar\omega_c} \propto \left(\frac{W}{V}\right)^2 \quad (3.6)$$

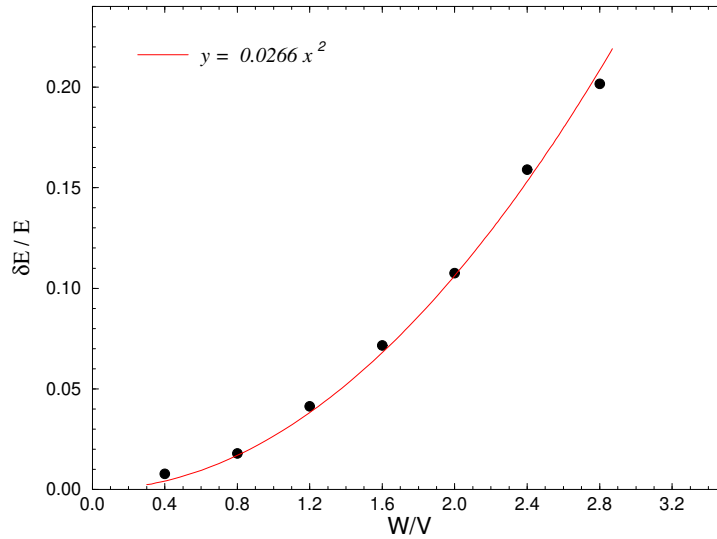


Figura 3.11: Deslocamento em energia dos estados estendidos em relação ao centro da primeira banda de Landau, em função da desordem W/V . Em vermelho, o ajuste dos pontos por uma dependência quadrática. $\phi/\phi_0 = 0.05$.

Esta formalização que fizemos para o resultado de levitação é inédita entre os estudos numéricos realizados até aqui. A dependência obtida está de acordo com os cálculos analíticos perturbativos de Haldane e Yang [42] e de Fogler [14] (ver Apêndice B, notando que as expressões (B.2) e (B.4) prevêm $\delta E/\hbar\omega_c \propto W^2$). Entretanto deve-se notar que a definição de δE adotada nestes trabalhos analíticos é diferente da definição que adotamos. Para eles δE é a diferença entre a energia do estado estendido e a energia prevista para o nível de Landau pelo modelo contínuo, não levando em conta o afundamento da densidade de estados.

3.4 Variando o fluxo magnético

3.4.1 Evidências da levitação

Numa outra análise, mantivemos o valor de desordem constante e variamos o fluxo magnético no sistema, para observar a evolução dos estados estendidos e, mais uma vez, procurar evidências de levitação.

Conseguimos observar a levitação em função da redução de fluxo para a primeira banda de Landau. Em particular notamos que esta levitação é mais acentuada (e portanto mais facilmente observável) para valores grandes de desordem, onde mesmo para fluxos altos, da ordem de $\phi/\phi_0 = 0.1$, os estados estendidos já estão um pouco deslocados em relação ao centro da banda. Nos trabalhos numéricos existentes sobre a questão da levitação sempre foi estudada apenas a levitação com aumento de desordem e não com a redução do campo magnético propriamente dito. Apesar dos efeitos serem qualitativamente similares (ambos os casos levam à redução de $\omega_c\tau$), acreditamos ser relevante a observação de levitação com redução de campo. Desta forma, foi possível quantificar o efeito da variação de B sobre o comportamento dos estados estendidos e comparar com as previsões existentes [11, 12, 14, 42].

Na Figura (3.12) mostramos o cálculo da Razão de Participação, juntamente com a densidade de estados, para 5 diferentes valores de fluxo, e desordem fixa $W/V=2.0$.

Todos os gráficos da Figura (3.12) estão na mesma escala de energia (e também de RP). Com a redução do fluxo, as bandas de Landau aproximam-se e o número de estados em cada banda vai diminuindo. Os quatro primeiros valores de fluxo apresentados correspondem a sistemas com 40x40 sítios (sendo estes os quatro menores fluxos possíveis de serem considerados para este tamanho de rede, conforme discutido na seção 2.5.4). Para o cálculo com o

fluxo $\phi/\phi_0 = 0.0182$, aumentamos o tamanho da rede apenas na direção x (ver seção 2.3), considerando uma rede de 55x40 sítios. Similarmente ao caso de aumento de desordem, a partir de um determinado grau de superposição entre as bandas, não é mais possível definir a posição dos estados estendidos (divergência na Razão de Participação).

O deslocamento do pico da RP em relação ao centro da banda (levitação) pode também ser observado nesse caso e, para mostrar isso com mais clareza, na Figura (3.13) mudamos as escalas dos gráficos da figura anterior, de modo a focalizar a primeira banda de Landau. A posição aproximada dos estados estendidos está indicada pela linha pontilhada.

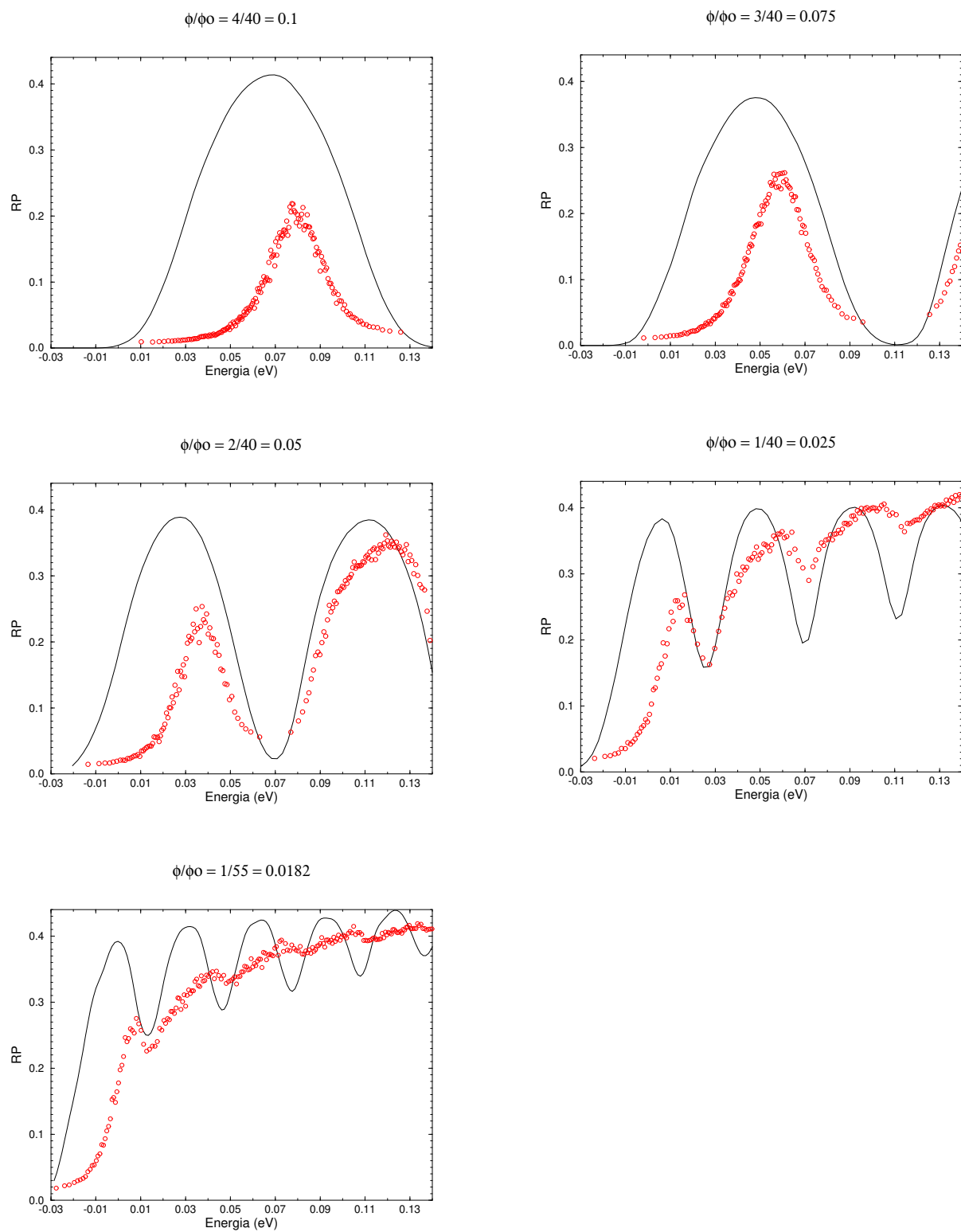


Figura 3.12: Evolução da Razão de Participação (círculos vermelhos) e da Densidade de Estados (linha preta) com a redução do fluxo magnético (ϕ/ϕ_0) no sistema. $W/V = 2.0$.

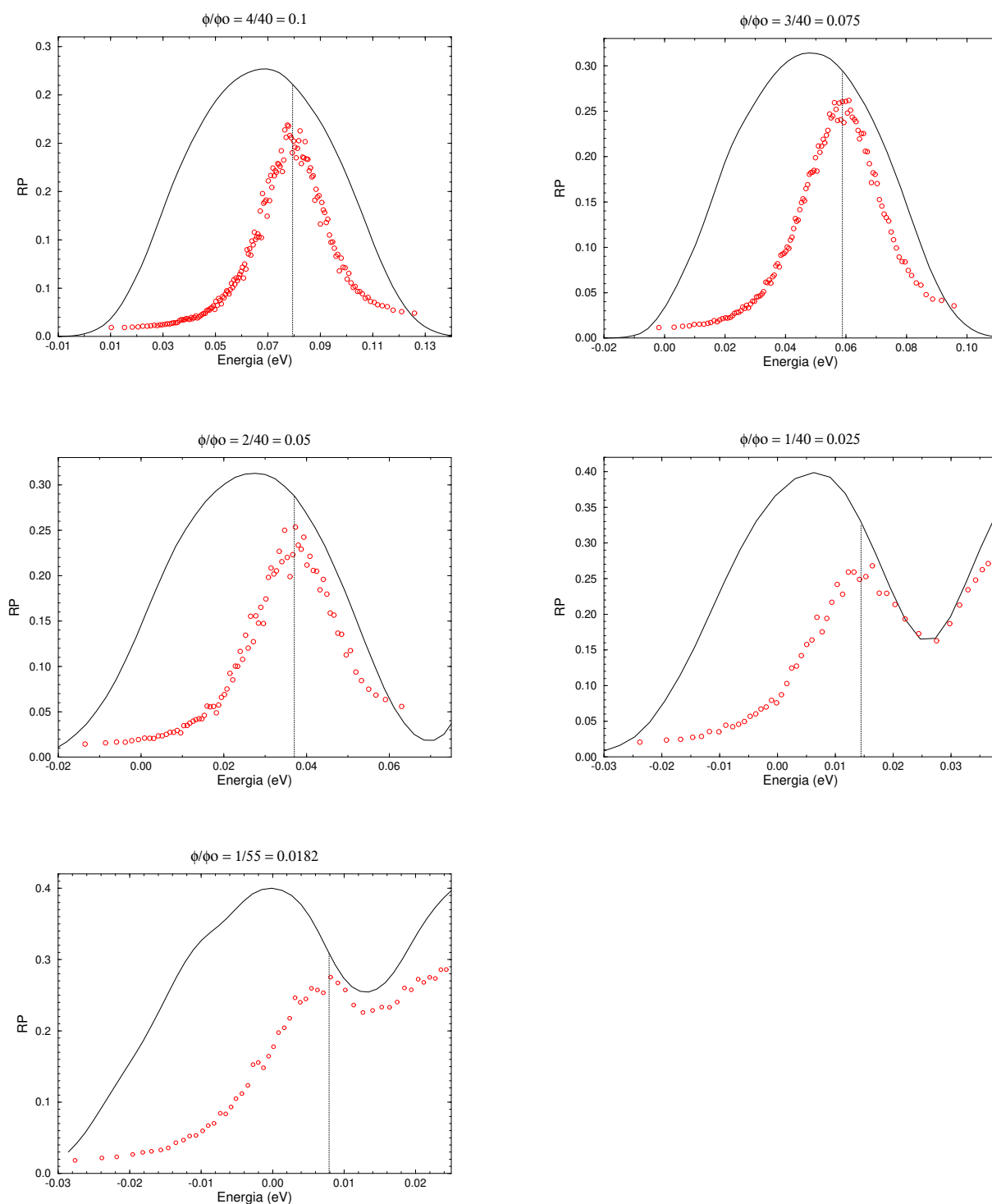


Figura 3.13: Posição dos estados estendidos (indicada pela linha pontilhada), em relação à Densidade de Estados da primeira banda de Landau. Observa-se, com a redução do fluxo magnético, um deslocamento no sentido das mais altas energias. $W/V = 2.0$.

3.4.2 Quantificando a levitação pelo desvio $\delta E/E$

Assim como foi feito para o caso de desordem crescente, formalizamos esse resultado de levitação, calculando a diferença em energia δE entre o máximo da RP (energia do estado estendido) da primeira banda de Landau e o máximo da Densidade de Estados desta banda, para cada um dos diferentes valores de fluxo mostrados nas figuras anteriores. Deve-se observar que aqui no caso de variação de fluxo magnético, onde a distância entre as bandas varia, a parametrização feita dividindo-se cada δE pela separação em energia entre as bandas ($E = \hbar\omega_c$), torna-se importante. A idéia desta parametrização é que tenhamos uma medida de quanto o estado estendido se deslocou em relação à distância entre as bandas, ou seja, de quão próximo ou distante ele está do centro da próxima banda de Landau (se tivéssemos, por exemplo, $\delta E/E = 1$, o estado estendido da 1ª banda teria deslocado-se em energia até a posição correspondente ao centro da 2ª banda de Landau).

Foram então determinados os desvios $\delta E/E$, conforme a expressão (3.5), e os resultados obtidos estão no gráfico da Figura (3.14) a seguir.

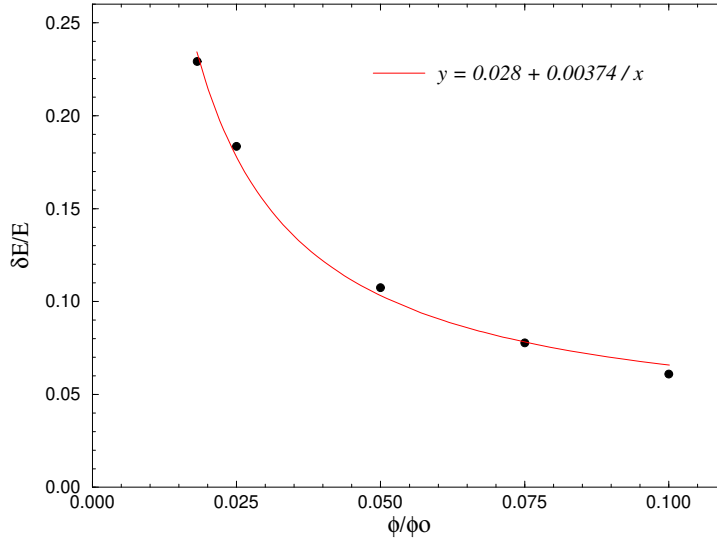


Figura 3.14: Deslocamento em energia dos estados estendidos em relação ao centro da primeira banda de Landau, em função do fluxo magnético ϕ/ϕ_0 . Em vermelho, o ajuste tipo $1/x$. $W/V = 2.0$.

Observa-se de fato que, quanto menor o fluxo magnético, maior o desvio $\delta E/\hbar\omega_c$. Os

pontos da curva são muito bem ajustados por uma relação tipo $1/(\phi/\phi_0)$, ou seja, $1/B$:

$$\frac{\delta E}{\hbar\omega_c} \propto \frac{1}{B} \quad (3.7)$$

Esta dependência obtida está de acordo com Fogler [14] (ver Apêndice B, expressão (B.4), mas não com Haldane e Yang [42], que prevêem uma dependência $\delta E/E \propto 1/B^4$ (ver Apêndice B, expressão (B.2)). Vale também ressaltar que a dependência com $1/B$ é diferente da dependência proposta inicialmente por Laughlin [11] e Khmelnitskii [12], que previa $\delta E/E \propto 1/B^2$.

3.5 $\delta E/E$ em função do alargamento relativo da banda

Acabamos de mostrar, nas duas seções anteriores, como se dá a levitação em energia dos estados estendidos da primeira banda de Landau, tanto para a variação de desordem quanto para a variação de campo magnético. Os dois casos foram analisados separadamente.

Para comparar o efeito destas duas variações, fizemos um gráfico dos desvios $\delta E/E$ não mais em função da desordem ou do fluxo, mas sim em função da razão $\hbar\omega_c/\Gamma$. Sendo que Γ é o alargamento em energia, a meia altura, da banda de Landau, como indicado na Figura (3.15) abaixo.

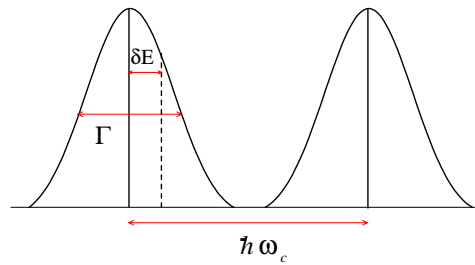


Figura 3.15: Esquema das bandas de Landau, com indicações das duas escalas de energia relevantes: Γ - a largura a meia altura da banda, e $\hbar\omega_c$ - a separação entre as bandas. A linha pontilhada indica as posições dos picos dos estados estendidos, sendo δE a levitação em energia.

Desta forma, $\hbar\omega_c/\Gamma \gg 1$ corresponde ao caso de bandas bem separadas, ou seja, ao limite

de altos campos e/ou baixas desordens. Conforme $\hbar\omega_c/\Gamma$ vai diminuindo e aproximando-se de 1, a superposição entre as bandas começa a ficar importante.

Assim, propomos uma nova forma de apresentar os resultados de levitação, colocando em um mesmo gráfico, mostrado na Figura (3.16), os desvios $\delta E/E$ obtidos para fluxo fixo e desordem variando (círculos pretos) e desordem fixa e fluxo variando (círculos sem preenchimento).

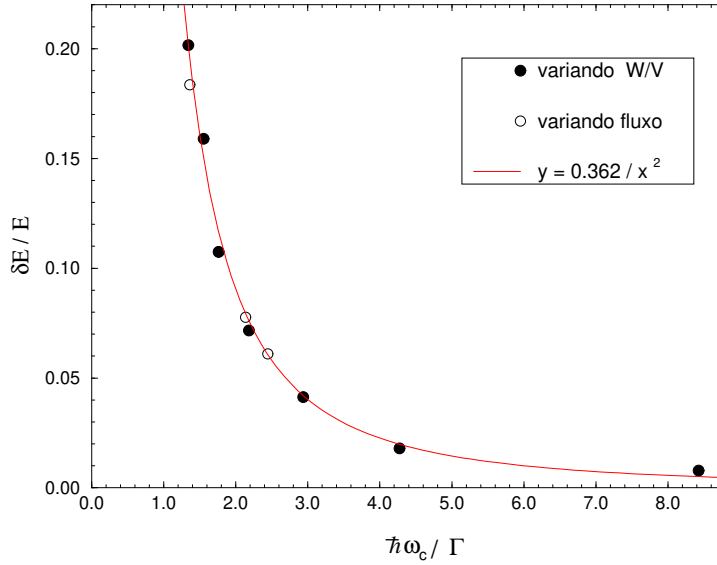


Figura 3.16: Levitação $\delta E/E$ dos estados estendidos em relação ao centro da primeira banda de Landau, em função da razão $\hbar\omega_c/\Gamma$.

É muito interessante notar que os dois conjuntos de dados caíram exatamente sobre uma mesma curva. Ambos foram bem ajustados pela seguinte curva (do tipo $y \propto 1/x^2$):

$$\frac{\delta E}{E} = \frac{0.362}{(\hbar\omega_c/\Gamma)^2} \quad (3.8)$$

Encontramos portanto uma relação que é muito mais geral que as relações obtidas a partir dos gráficos da Figuras (3.11) e (3.14), pois aquelas valiam apenas para valores específicos de fluxo ou de desordem. A relação (3.8) representa uma unificação dos dois comportamentos anteriormente observados e mostrou-se válida para qualquer valor de fluxo e de desordem.

Vale lembrar que $\hbar\omega_c$ é diretamente proporcional a B, e que Γ varia linearmente com W e

com a raiz quadrada de B , conforme foi mostrado na seção 3.1. Assim, verifica-se facilmente que a expressão (3.8) é coerente com as expressões (3.6) e (3.7) anteriormente obtidas. Ressaltamos também que esta é uma forma de expressar os resultados de levitação que torna possível uma comparação direta com resultados experimentais, uma vez que o alargamento da banda e a distância entre bandas são parâmetros que podem ser determinados experimentalmente. Os trabalhos analíticos e numéricos que tratam do assunto, colocam a levitação em função de quantidades como W (a amplitude de flutuação do potencial desordenado aleatório) ou τ (o tempo de espalhamento elástico). Assim, a compararação deste tipo de resultado com resultados experimentais torna-se difícil, uma vez que W ou τ não são quantidades bem definidas experimentalmente.

3.6 Levitação em Fator de Preenchimento

Até aqui a levitação dos estados estendidos foi analisada pelo deslocamento em energia destes em relação ao centro das bandas de Landau. Outra forma de identificar e quantificar a levitação é através da observação do fator de preenchimento das bandas até a posição do estado estendido.

Para desordens pequenas e fluxos altos ($\hbar\omega_c/\Gamma \gg 1$), quando os estados estendidos ocorrem bem no centro das bandas, para que o nível de Fermi encontre-se no estado estendido da primeira banda, 50% dos estados desta banda deverão estar ocupados (fator de preenchimento: $\nu = 0.5$). Conforme a desordem cresce ou o campo magnético é reduzido, vimos que o estado estendido desloca-se do centro da primeira banda. Com isso, mais de 50% da banda (fator de preenchimento: $\nu > 0.5$) precisa ser preenchida até que se chegue ao estado estendido.

A Figura (3.17) mostra curvas de Razão de Participação dos estados da primeira banda de Landau, para dois valores de desordem: $W/V = 0.4$ e $W/V = 2.0$. Ambas foram calculadas para sistemas com 40×40 sítios na rede e fluxo magnético $\phi/\phi_0 = 0.05$. Como vimos, para estes parâmetros temos 80 estados eletrônicos por banda de Landau. As setas indicam o estado que corresponde aproximadamente ao pico da RP.

Portanto, nitidamente, o aumento da desordem provoca um aumento do fator de preenchimento da primeira banda até a posição do estado estendido. Para uma desordem pequena,

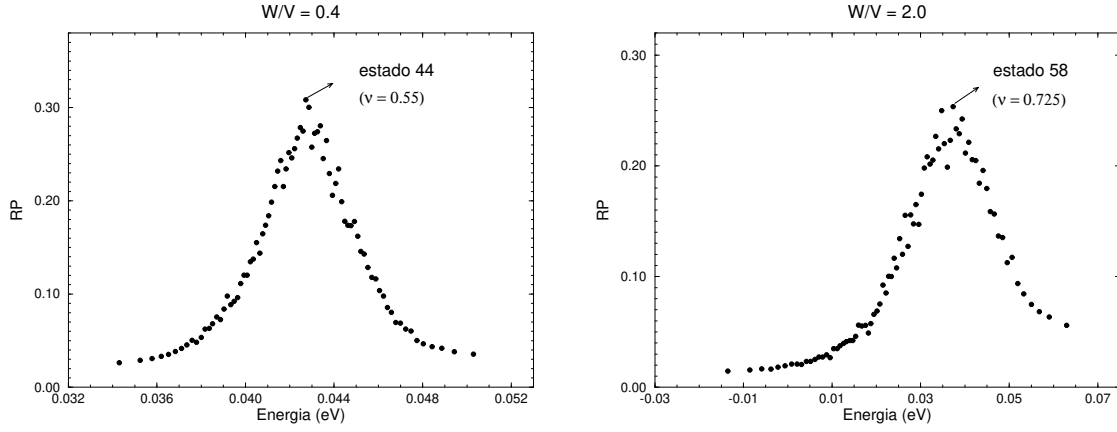


Figura 3.17: Diferenças observadas na Razão de Participação da primeira banda de Landau para desordens $W/V = 0.4$ e 2.0 . O fator de preenchimento na posição do pico da RP, indicado pelas setas, aumenta com o aumento de desordem.

como $W/V = 0.4$, esse aumento ainda é bem pequeno ($\nu = 0.55$) e a curva de RP é basicamente simétrica. Conforme a desordem aumenta, curva da RP vai se tornando assimétrica. Para $W/V = 2.0$, nota-se claramente esta assimetria, e o pico está definido em torno do estado de número 58, ou seja, onde o fator de preenchimento da banda é $\nu = 0.725$.

Acompanhamos então, para diferentes desordens, a evolução do fator de preenchimento da primeira banda até o estado estendido, e o resultado obtido está na Figura (3.18). Para determinarmos o número do estado em torno do qual o pico da RP é definido, fizemos suavizações das curvas de RP. Mesmo assim, em geral há uma imprecisão de mais ou menos dois estados nesta determinação, o que neste caso leva a uma imprecisão de ± 0.025 no fator de preenchimento, como representado pelas barras de erro no gráfico.

A linearidade observada é marcante. Como indicado no próprio gráfico, o ajuste linear fornece:

$$\nu = 0.104 \frac{W}{V} + 0.509 \quad (3.9)$$

Alguém poderia se perguntar por quê a levitação em fator de preenchimento ocorre desta forma linear, ao invés de tornar-se cada vez mais pronunciada com o aumento da desordem,

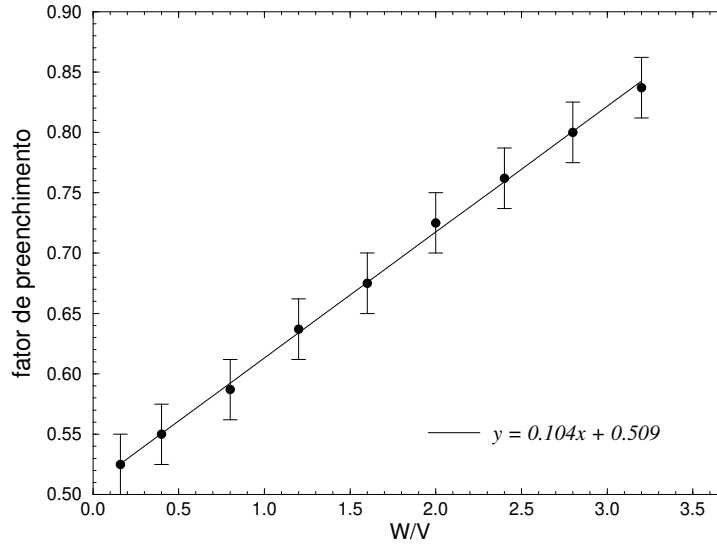


Figura 3.18: Fator de preenchimento da primeira banda até que se chegue ao pico da RP (estado estendido), em função da desordem no sistema. $\phi/\phi_0 = 0.05$.

como no caso da dependência com $(W/V)^2$ observada na levitação em energia (Figura (3.11)). Esses comportamentos não são contraditórios. Vejamos, para exemplificar, esse caso de 80 estados por banda. Quando o estado estendido deixa de estar no estado 40 e passa ao 45, ambos estão na região central da banda, onde há alta densidade de estados. Portanto estes estados estão bem próximos em energia. Por outro lado, quando o estado estendido corresponder, digamos, ao estado 65 e com o aumento de desordem passar ao estado 70, a variação em fator de preenchimento será exatamente a mesma do caso anterior. Entretanto, como estes são estados do extremo da banda, região de mais baixa densidade de estados, a separação em energia entre eles é maior, e portanto o deslocamento em energia observado neste caso será maior que no caso anterior.

Ficam claras assim as diferenças entre estas duas maneiras de quantificar a levitação. É importante ter em mente esta distinção quando se quiser analisar resultados existentes sobre a levitação, pois alguns autores observam a levitação através das variações no fator de preenchimento [17, 21, 23, 28] e outros (trabalhos numéricos e analíticos de um modo geral) através das posições em energia dos estados estendidos.

Um ponto bastante relevante para se notar aqui, é que estes resultados apresentados cla-

ramente contradizem o conceito de “levitação aparente” sugerido por Liu, Xie e Niu [29]. Segundo eles, o aumento observado no fator de preenchimento em função do aumento de desordem ou redução de campo magnético, não seria devido à levitação dos estados estendidos; seria apenas uma consequência da superposição na densidade de estados, como esquematizado na Figura (3.19). A partir da superposição, estados de bandas superiores passariam a contribuir para o aumento do número de estados até a posição dos estados estendidos das primeiras bandas (principalmente para a primeira banda).

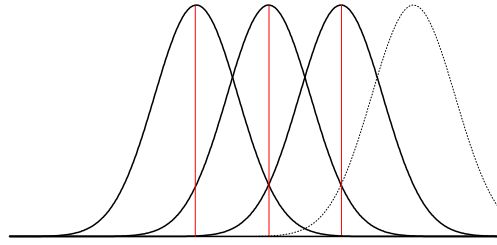


Figura 3.19: Esquema de superposição de bandas de Landau. Segundo a teoria de “levitação aparente”, os estados estendidos (em vermelho) permaneceriam sempre no centro das bandas, e a levitação observada em fator de preenchimento seria então explicada exclusivamente pela superposição das diferentes bandas.

Ainda recentemente, os resultados experimentais de Hilke *et al* [28] foram analisados como sendo devidos a esta levitação aparente. Nossos resultados tornam evidente que o processo de levitação ocorre bem antes mesmo da superposição das bandas de Landau (como pode ser visto na Figura (3.8), para $W/V < 2.0$ não há superposição alguma). Não obstante, é claro que a partir de superposições significativas, o efeito mencionado por Liu, Xie e Niu [29] e por Hilke *et al* [28] pode ser importante, somando-se à levitação real observada (uma discussão mais aprofundada sobre isso será feita no capítulo seguinte, seção 4.4).

Capítulo 4

Resultados II :

Desordem Correlacionada

A forma com que consideramos correlações entre as energias aleatórias geradas para os sítios da rede foi discutida na seção 2.2.2.

A maioria dos trabalhos que abordaram a questão da levitação numericamente utilizaram o modelo de desordem tipo ruído branco. Recentemente entretanto, alguns autores [36, 38] começaram a trabalhar com modelos de desordem correlacionada.

Os trabalhos analíticos de Haldane e Yang [42] e de Fogler [14] prevêm uma dependência da levitação em energia com o comprimento de correlação do potencial desordenado (ver Apêndice B).

Fazemos neste capítulo uma análise similar à apresentada no capítulo anterior, estudando os efeitos deste outro modelo de desordem sobre a levitação. Apresentamos também uma comparação direta entre os dois modelos de desordem, comparação esta inédita entre os trabalhos numéricos sobre levitação de estados estendidos.

4.1 Densidade de Estados

Trataremos primeiramente dos efeitos desta correlação no potencial desordenado sobre a densidade de estados dos sistemas estudados. A Figura (4.1) mostra as diferentes densidades de estados obtidas quando consideramos diferentes comprimentos de correlação (λ) na desor-

dem. São mostradas apenas as quatro primeiras bandas de Landau. Todos os sistemas estão submetidos ao mesmo fluxo magnético, $\phi/\phi_0 = 0.05$, e para todos foi considerado $W/V = 1.6$. A linha pontilhada corresponde à desordem tipo ruído branco (limite em que $\lambda = 0$).

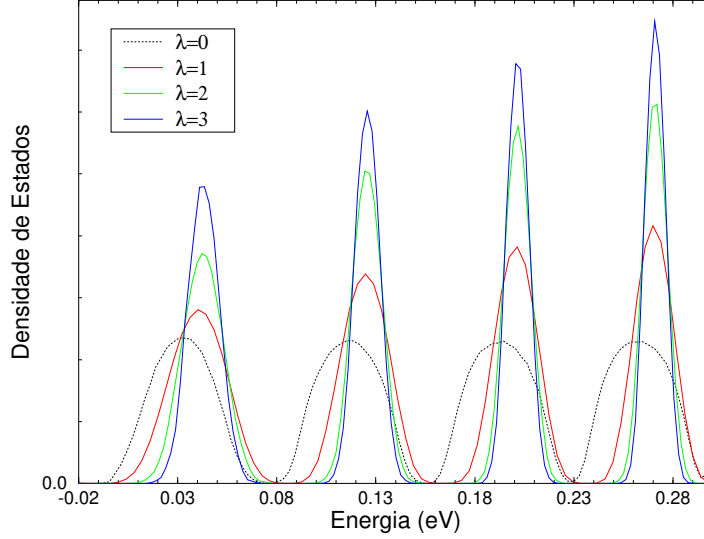


Figura 4.1: Densidades de Estados para diferentes comprimentos de correlação (λ) na desordem. O caso $\lambda = 0$ é obtido com o modelo de desordem não-correlacionada (ruído branco). Em todos os casos considerou-se $W/V = 1.6$ e $\phi/\phi_0 = 0.05$.

Observa-se que a correlação torna as bandas cada vez mais estreitas, quando comparadas ao ruído branco. Esse comportamento foi estudado por Ando e Uemura [59], que deduziram que, para espalhadores da mesma magnitude W , a largura da banda com correlação (Γ_λ) seria reduzida por um fator β em relação à largura sem correlação (Γ):

$$\Gamma_\lambda = \frac{\Gamma}{\beta} \quad ; \quad \beta = \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda}{l_B}\right)^2} \quad (4.1)$$

onde $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ é o comprimento magnético. (Vale ressaltar aqui que Ando e Uemura [59] realizaram um amplo estudo das características do alargamento dos níveis de Landau, em particular discutindo a dependência deste alargamento com o comprimento de correlação do potencial desordenado).

Uma importante diferença que aparece na densidade de estados para a desordem correlacionada, é que a largura das bandas passa a ser dependente do índice N da banda. Pode-se observar na Figura (4.1) que, enquanto no caso $\lambda = 0$ a largura é constante para todas as bandas, na presença de correlação há um nítido estreitamento das bandas com o aumento do índice N [59].

Quando observamos o efeito da desordem sobre a Densidade de Estados, notamos ainda outra importante diferença entre os dois modelos de desordem. Na Figura (4.2) estão densidades de estados (normalizadas) para diferentes amplitudes de desordem W/V . Notamos, quando comparamos esta com a Figura (3.3), que o “afundamento” das bandas em energia com o aumento da desordem é muito menos pronunciado do que no caso do ruído branco. Agora as bandas apenas sofrem o esperado alargamento com a desordem, mas o centro das bandas mantém-se sempre no mesmo valor de energia aproximadamente.

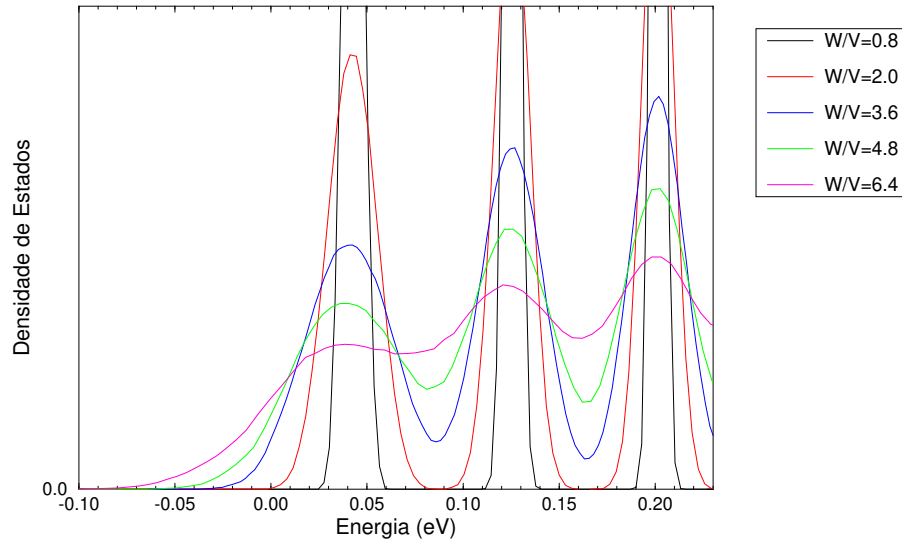


Figura 4.2: Densidades de Estados (normalizadas) para diferentes desordens. Para todas, $\lambda = 2$ e $\phi/\phi_0 = 0.05$.

Fizemos, também para este modelo de desordem, a análise da dependência da largura das bandas (Γ) com a desordem. Mais uma vez obtivemos uma dependência linear, como mostra a Figura (4.3) (pelo menos neste intervalo de desordem, onde conseguimos determinar a largura das bandas a meia altura).

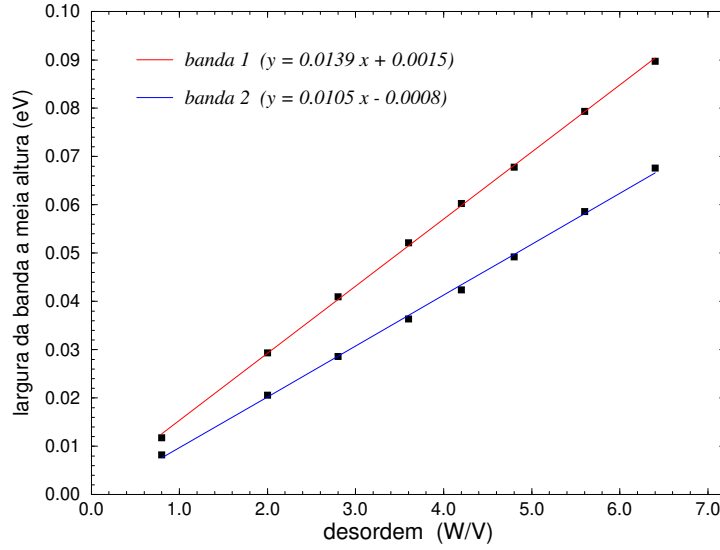


Figura 4.3: Largura a meia altura das duas primeiras bandas de Landau em função da desordem. $\lambda = 2$ e $\phi/\phi_0 = 0.05$.

Foram determinados os alargamentos, a meia altura, das duas primeiras bandas de Landau. Os dados da Figura (4.3) correspondem ao caso $\lambda = 2$ e fluxo $\phi/\phi_0 = 0.05$. As relações entre Γ e W/V , obtidas pelo ajuste dos pontos do gráfico, são dadas por (o termo constante que aparece no ajuste - coeficiente linear da reta - é desprezível em ambos os casos):

$$1^a \text{ Banda : } \Gamma = 0.0139 W/V \quad (4.2)$$

$$2^a \text{ Banda : } \Gamma = 0.0105 W/V \quad (4.3)$$

4.2 Localização dos Estados: cálculo da Razão de Participação

Vamos agora examinar o resultado do cálculo da Razão de Participação (RP) dos estados para a desordem correlacionada, mais uma vez tentando acompanhar o destino dos estados estendidos com o aumento da superposição entre as bandas de Landau.

A apresentação dos resultados de levitação poderá ser bem mais sintética neste capítulo, uma vez que as formas adotadas para expor e analisar estes resultados já foram discutidas no Capítulo 3. O importante aqui será observar e discutir as diferenças entre os dois modelos de desordem.

A Figura (4.4) a seguir é análoga à Figura (3.8): mostra a densidade de estados (linha preta) e a Razão de Participação (círculos vermelhos), para desordens variando desde o caso em que as bandas estão bem separadas até o limite em que a superposição de bandas é tão grande que não mais se definem os picos da RP. Considerou-se para estes gráficos um comprimento de correlação $\lambda = 2a$.

A comparação entre as Figuras (4.4) e (3.8) torna evidentes alguns efeitos sobre a RP devidos à consideração de correlação na desordem (em particular devidos a uma correlação de relativamente longo alcance: neste caso $\lambda = 2a$. Ver Figura (2.1)). Dentre as diferenças mais marcantes podem ser ressaltadas duas:

- A correlação no potencial desordenado torna os picos da RP bem definidos também para as demais bandas além da primeira. Isso permite que seja feita uma comparação entre os processos de levitação de estados estendidos de diferentes bandas de Landau. Para o ruído branco foi possível analisar a evolução do estado estendido apenas para a primeira banda, uma vez que as demais bandas não apresentavam uma divergência bem definida na RP.

- Na desordem tipo ruído branco, quando a superposição entre as bandas fica significativa, como no caso da desordem $W/V = 3.6$ na Figura (3.8) (onde ainda observa-se alguma modulação na densidade de estados) não se consegue mais definir os picos na RP. Por outro lado, no caso de desordem correlacionada, os picos são bem definidos até situações de maiores superposições na densidade de estados. Isso pode ser observado, por exemplo, para a desordem $W/V = 8.0$ na Figura (4.4), onde praticamente já se perdeu a modulação na densidade de estados, mas os picos na RP correspondentes aos estados estendidos das diferentes bandas de Landau ainda estão bem definidos.

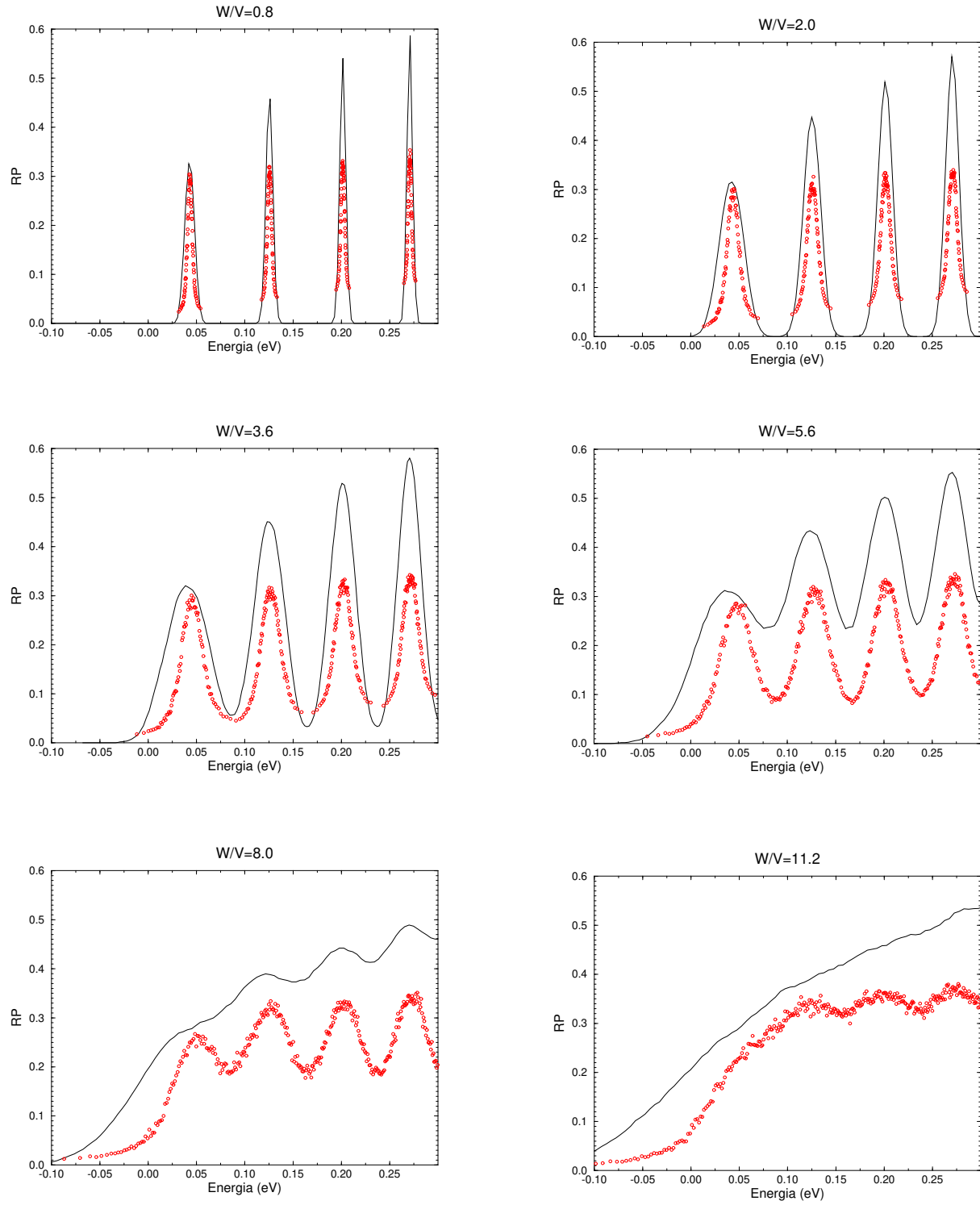


Figura 4.4: Evolução da Razão de Participação (círculos vermelhos) e da Densidade de Estados (linha preta) com o aumento da desordem (W/V) no sistema com desordem correlacionada. $\lambda = 2a$. $\phi/\phi_0 = 0.05$.

4.3 Levitação em energia

Quanto à levitação de estados estendidos, o comportamento dos sistemas sujeitos a este modelo de desordem correlacionada também apresenta diferenças significativas em relação ao comportamento observado no ruído branco. Em particular, observa-se que, como o “afundamento” em energia da densidade de estados é muito menor, o processo de levitação neste modelo ocorre com os estados estendidos realmente deslocando-se para mais altas energias à medida que a desordem aumenta. Ou seja, a levitação em energia pode ser observada em termos absolutos, mesmo quando não se faz a comparação com a densidade de estados.

A Figura (4.5) é equivalente à Figura (3.10), porém para a desordem correlacionada (inclusive, para facilitar a comparação entre estas figuras, a escala em energia das duas é a mesma). É esquematizada a evolução da posição em energia do máximo da densidade de estados (DES) e do pico da Razão de Participação com a desordem crescente, para as duas primeiras bandas de Landau, no caso de $\lambda = 2a$. Estes valores em energia estão comparados às energias dos níveis de Landau previstas pelo modelo contínuo, para as duas primeiras bandas.

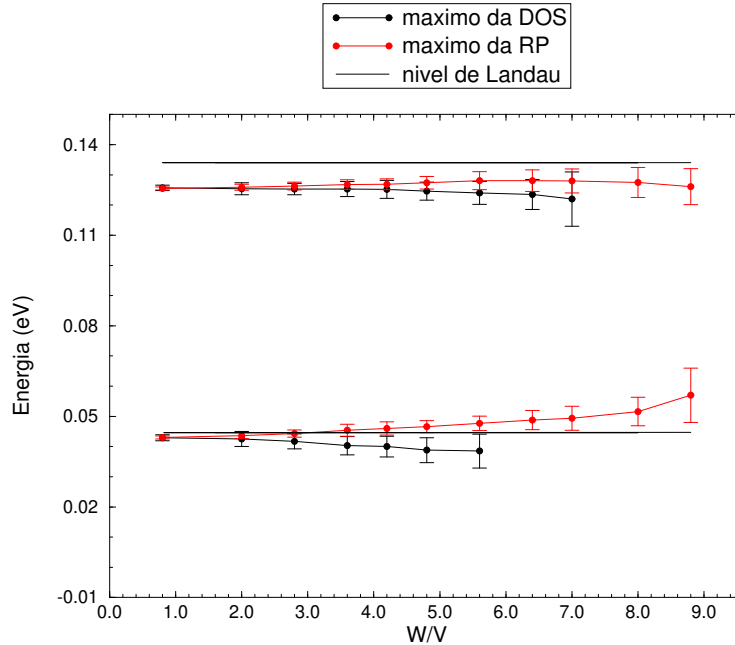


Figura 4.5: Posição em energia do máximo da DES e do máximo (pico) da RP em função da desordem. Observa-se a levitação dos estados estendidos, que agora não é mais apenas relativa, mas ocorre em termos absolutos. $\lambda = 2a$ e $\phi/\phi_0 = 0.05$.

A Figura (4.6) abaixo mostra um *zoom* da Figura (4.5) anteriormente apresentada, evidenciando a região da primeira banda de Landau: observa-se assim mais claramente o comportamento dos estados estendidos e do centro da banda. Enquanto a banda como um todo tem um ligeiro afundamento em energia, o máximo da RP nitidamente afasta-se do centro da banda, deslocando-se para mais altas energias.

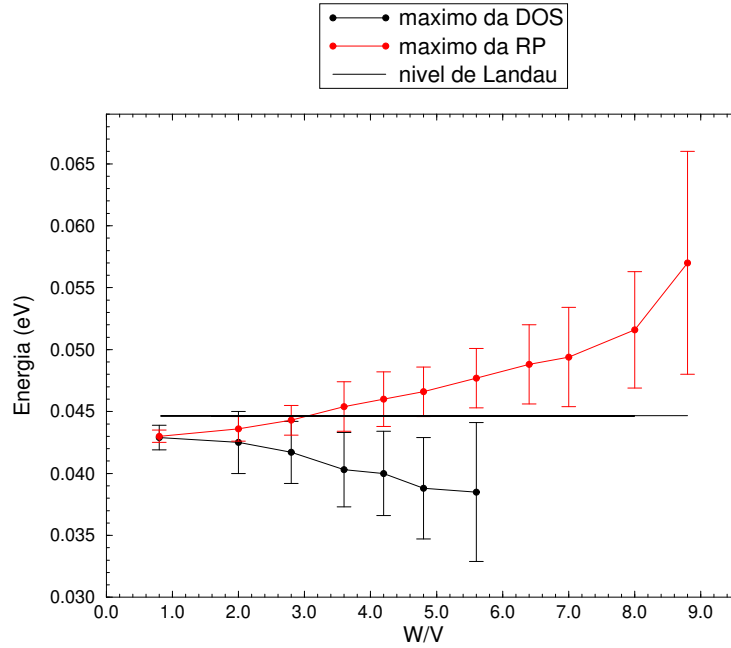


Figura 4.6: Posição em energia do máximo da DES e do máximo (pico) da RP em função da desordem. Zoom na região da primeira banda de Landau.

4.3.1 Quantificando a levitação

Para cada valor de desordem, determinamos então, o desvio δE entre a posição do estado estendido e o centro da banda (fizemos isso tanto para a primeira como para a segunda banda de Landau). Assim como foi feito no caso do ruído branco (ver discussão na seção 3.5), observamos estes resultados num gráfico de $\delta E/\hbar\omega_c$ em função de $\hbar\omega_c/\Gamma$, conforme mostrado na Figura (4.7). Neste gráfico mostramos os resultados obtidos para a desordem correlacionada ($\lambda = 2a$) referentes à primeira (quadrados vermelhos) e segunda (triângulos azuis) bandas de Landau, juntamente com os resultados anteriormente obtidos para a desordem

não-correlacionada tipo ruído branco (círculos pretos).

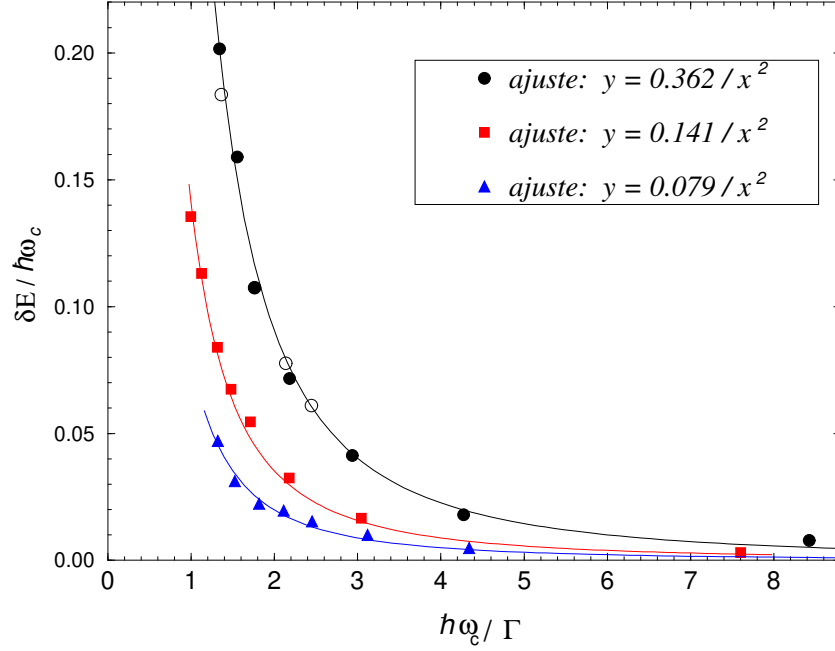


Figura 4.7:

Este gráfico da Figura (4.7) congrega diversas importantes informações que devem ser cuidadosamente observadas.

Um fato marcante é que todos os conjuntos de pontos foram bem ajustados pelo mesmo tipo de curva: $\delta E / \hbar\omega_c \propto 1 / (\hbar\omega_c / \Gamma)^2$.

Primeiramente pode-se comparar as curvas preta e vermelha; ou seja, olhar apenas para a primeira banda de Landau em cada um dos modelos. É evidente que a correlação no potencial provocou uma diminuição na magnitude de levitação. Esta observação está qualitativamente de acordo com as previsões dos cálculos perturbativos de Haldane e Yang [42] e de Fogler [14] (ver Apêndice B), que de fato esperam que quanto maior o comprimento de correlação na desordem, menor o desvio δE dos estados estendidos.

Deve-se notar que a comparação entre modelos é estabelecida aqui da maneira adequada: apesar de para um mesmo W/V a correlação produzir um menor alargamento para as bandas (Figura (4.1)), 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, a levitação no modelo de desordem correlacionada é menor do que no ruído branco.

Outra importante comparação é entre a levitação do estado estendido da primeira banda (curva vermelha) e o da segunda banda de Landau (curva azul), que foi possível estabelecer neste modelo de desordem correlacionada. O estado estendido da segunda banda apresenta uma levitação menos acentuada que o da primeira banda! Mais uma vez, como levamos em conta (no eixo x) o fato de a segunda banda ter um alargamento menor que o da primeira com a desordem, temos de fato uma levitação intrinsecamente menor para a segunda banda. Esta observação é de extrema importância. Por um lado ela contradiz a conjectura inicial para a levitação [11, 12] e também os cálculos analíticos existentes [14, 42], que prevêm que quanto maior o índice N da banda de Landau, maior a levitação dos estados estendidos: $\delta E \propto (N + 1/2)$. Mas por outro lado, esta observação concorda com alguns resultados experimentais que verificaram uma maior levitação para a primeira banda [21, 28].

Não estão mostrados aqui, mas os resultados para a levitação na terceira banda de Landau são ainda menores que para a segunda (a levitação também ocorre na terceira banda, mas os desvios δE são tão pequenos que a imprecisão na determinação dos picos passa a ser importante).

Nenhum outro trabalho numérico abordando esta questão de levitação de estados estendidos havia observado esta levitação menos acentuada quanto maior o índice da banda. A consequência desta observação sobre o proposto Diagrama de Fases Global para o Efeito Hall Quântico (ver seção 1.2.2) é que, a partir de determinado momento, o estado estendido da primeira banda encontraria o estado estendido da segunda banda, e assim por diante, dando origem à possibilidade de transições diretas entre platôs $s_{xy} > 1$ para o isolante.

4.4 Levitação em Fator de Preenchimento

Acompanhamos também o fator de preenchimento (ν) até a posição do estado estendido, para as duas primeiras bandas de Landau, procedendo da mesma maneira que fizemos para a desordem tipo ruído branco na seção 3.6.

Os resultados obtidos são mostrados na Figura (4.8), sendo que os valores para a segunda banda (em vermelho) foram transladados, subtraindo $\nu = 1$ de todos os pontos, a fim de facilitar a comparação com a levitação em preenchimento dos estados críticos da primeira banda. Ou seja, para a segunda banda, onde se vê $\nu = 0.5$ leia-se $\nu = 1.5$, por exemplo.

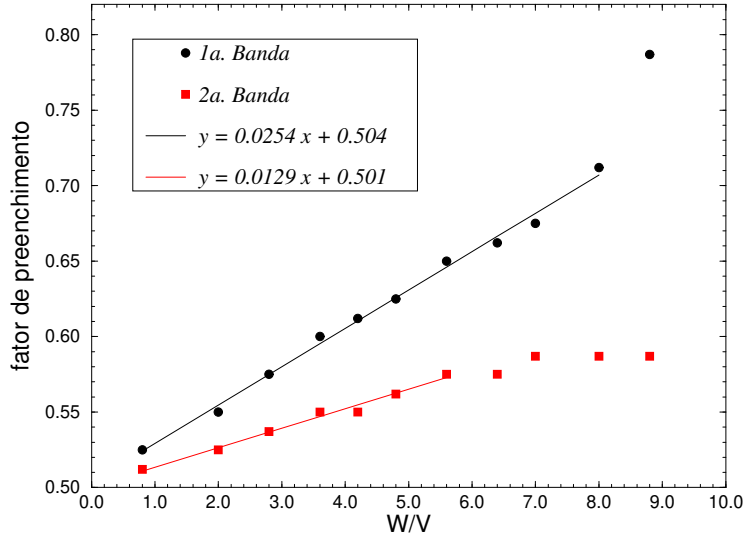


Figura 4.8: Preenchimento da primeira e da segunda banda até que se chegue ao pico da RP (estado estendido), em função da desordem no sistema. $\lambda = 2a$ e $\phi/\phi_0 = 0.05$.

Assim, também nesta forma de estudar a levitação, observa-se que a segunda banda apresenta levitação menos pronunciada que a primeira.

Do mesmo modo que no modelo de desordem estudado no capítulo anterior, aqui também a levitação em fator de preenchimento ocorre claramente antes da superposição entre as bandas (como pode ser observado na Figura (4.4)), a superposição começa a ocorrer a partir de $W/V \approx 3.6$.

No intervalo de desordens analisado no ruído branco, observou-se uma dependência estritamente linear entre ν e W/V (ver Figura (3.18)). Entretanto, para a desordem correlacionada

observa-se apenas inicialmente uma dependência linear, conforme indicado na Figura (4.8), seguindo as relações:

$$1^a \text{ Banda : } \quad \nu = 0.0254 W/V + 0.504 \quad (4.4)$$

$$2^a \text{ Banda : } \quad \nu = 0.0129 W/V + 0.501 \quad (4.5)$$

A partir de determinada desordem começam a ser observados desvios desta linearidade: Para a primeira banda, a partir de $W/V \approx 8.0$, observa-se o preenchimento aumentar mais que o previsto pela relação linear. Para a segunda banda, a partir de $W/V \approx 5.6$, verifica-se uma saturação no fator de preenchimento.

Ambos os desvios podem ser explicados considerando-se que a partir destas desordens a superposição das bandas passa a ser de fato importante na determinação do fator de preenchimento.

Como o alargamento das bandas diminui com o índice de Landau, quando a superposição é importante temos a situação esquematizada na Figura (4.9), onde as linhas vermelhas pontilhadas corresponderiam às posições dos estados estendidos nas duas primeiras bandas de Landau.

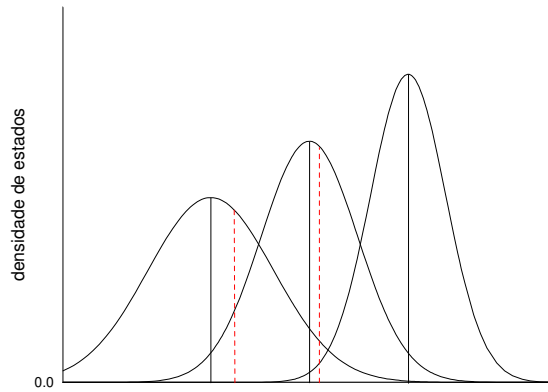


Figura 4.9: Esquema da superposição de bandas no modelo de desordem correlacionada, onde os alargamentos são dependentes do índice de Landau.

Ou seja, alguns estados da extremidade da segunda banda passam a contribuir para o aumento do fator de preenchimento observado na primeira banda. Esse tipo de desvio não

chegou a ser observado no ruído branco pois, como discutido na seção 4.2, na desordem correlacionada conseguimos acompanhar o pico da Razão de Participação até situações em que a superposição entre bandas é mais significativa que no ruído branco.

Por outro lado, o preenchimento da segunda banda até o estado estendido pode apresentar um comportamento interessante devido ao fato de os alargamentos não serem iguais neste modelo de desordem. Como pode-se observar na Figura (4.9), a partir de determinado momento a transposição da extremidade da primeira banda para depois do estado estendido da segunda banda (estados que serão subtraídos no cálculo do fator de preenchimento) é maior que a transposição da extremidade da terceira banda para antes do mesmo (estados que contribuirão para aumentar o fator de preenchimento). Sendo assim, passa a haver como resultante uma redução no fator de preenchimento da segunda banda. Isso explicaria o comportamento observado na Figura (4.8).

É importante, portanto, que fique claro que a levitação observada não é consequência apenas da superposição de densidade de estados: ocorre mesmo enquanto as bandas estão bem separadas. Entretanto, a partir do momento em que a superposição torna-se relevante, esse passa a ser mais um fator determinante do preenchimento das bandas até os estados estendidos.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho foram apresentados os resultados de uma série de investigações que fizemos sobre o destino dos estados estendidos das bandas de Landau no limite de baixos campos magnéticos e/ou altos graus de desordem no sistema (sistema este basicamente constituído de um gás bidimensional de elétrons independentes na presença de campo magnético perpendicularmente aplicado).

Abordando o problema numericamente, conseguimos identificar e quantificar o processo de levitação de estados estendidos, para ambos os modelos de desordem estudados: ruído branco e desordem correlacionada. De um modo geral, os trabalhos que observaram numericamente este efeito de levitação fizeram-no apenas de modo qualitativo, mostrando evidências de deslocamento dos estados estendidos. A análise quantitativa que foi exposta neste trabalho é inédita e importante no sentido de se estabelecer uma expressão geral para o efeito de levitação e de se montar o real diagrama de fases para o Efeito Hall Quântico.

As principais conclusões do trabalho podem ser assim resumidas:

- É essencial considerar a posição dos estados estendidos em relação ao centro das bandas de Landau (comparação com a densidade de estados) para caracterizar adequadamente a levitação. Vimos, em particular para o modelo de desordem não-correlacionada tipo ruído branco, que apesar das bandas deslocarem-se como um todo para mais baixas energias, observa-se nitidamente a levitação relativa dos estados estendidos.
- Conforme a desordem é aumentada, para um valor fixo de campo magnético e na

desordem tipo ruído branco, observamos a levitação ocorrer de acordo com a seguinte relação: $\delta E/\hbar\omega_c \propto (W/V)^2$ (onde δE foi definido como sendo a distância em energia entre o centro da banda de Landau e a posição do estado estendido naquela banda).

- Por outro lado, mantendo a desordem fixa e reduzindo o campo magnético (B), também para a desordem ruído branco, foi possível observar a levitação ocorrer, desta vez de acordo com: $\delta E/\hbar\omega_c \propto 1/B$. A observação de levitação para redução de campo magnético ainda não foi reportada por nenhum outro trabalho numérico.

- Propuzemos que a análise dos resultados de levitação $\delta E/\hbar\omega_c$ seja feita não mais em função de W/V ou de B , mas sim em função da razão entre a separação e o alargamento das bandas ($\hbar\omega_c/\Gamma$). Esta análise mostrou-se bastante interessante. Através dela concluímos por exemplo que há total equivalência entre variar o campo magnético ou variar a desordem, no resultado da levitação (no modelo de desordem tipo ruído branco).

- Um dos pontos fundamentais desta tese é a comparação entre os modelos de desordem. Quanto às diferenças na forma da densidade de estados e no grau de localização eletrônica, podem ser ressaltadas: 1) Na desordem correlacionada o alargamento das bandas diminui com o índice de Landau, enquanto no ruído branco este alargamento é o mesmo para todas as bandas. 2) Verificamos que o afundamento em energia sofrido pelas bandas devido à desordem é muito menor no caso da desordem correlacionada. 3) Na desordem correlacionada, os picos da Razão de Participação, que identificam estados estendidos, são bem definidos para todas as bandas (não apenas para a primeira, como no ruído branco) e podem ser acompanhados até situações de maior superposição entre bandas (menores valores de $\hbar\omega_c/\Gamma$).

- Quanto à levitação dos estados estendidos, conseguimos estabelecer uma importante comparação entre os modelos de desordem, comparando-os também através da esquematização que propuzemos - na forma de $\delta E/\hbar\omega_c$ em função de $\hbar\omega_c/\Gamma$. Desta maneira, obtivemos fortes evidências de um *comportamento universal* para a levitação : $\delta E/\hbar\omega_c \propto (\hbar\omega_c/\Gamma)^{-2}$. Este comportamento foi verificado para os diferentes modelos de desordem e também para diferentes bandas de Landau. Esta relação geral de proporcionalidade mostrou-se dependente do índice da banda (N) e do comprimento de correlação (λ).

- A correlação na desordem produz uma diminuição na magnitude de levitação δE

observada, quando comparada ao ruído branco. Esta observação está qualitativamente de acordo com as previsões dos cálculos perturbativos de Haldane e Yang [42] e de Fogler [14].

- Para a desordem correlacionada, foi possível quantificar também a levitação para a segunda banda de Landau e verificou-se uma levitação menor para esta do que a observada para a primeira banda. Isso contradiz tanto as conjecturas iniciais de levitação [11, 12], quanto os cálculos analíticos existentes [14, 42]. Também não havia ainda nenhuma previsão numérica para este fato. Entretanto, a levitação menos acentuada para a segunda banda confirma algumas observações experimentais [21, 28] e, se este comportamento for extrapolado para $\hbar\omega_c/\Gamma < 1$, dará suporte às observações de transições diretas $s_{xy} > 1$ para o isolante [25, 26, 27].

- No limite de $\hbar\omega_c/\Gamma < 1$, perde-se numericamente a definição dos picos da Razão de Participação e não se consegue mais acompanhar a posição dos estados estendidos. Diante disso alguns autores consideraram que estaria havendo neste limite uma “fusão” entre estados estendidos de diferentes bandas. Ressaltamos entretanto que é necessário cuidado ao se considerar este limite, pois aí os efeitos de tamanho do sistema passam a ser importantes.

- Além destas análises feitas para a levitação em energia, outra importante conclusão do trabalho é que a levitação observada através do aumento do fator de preenchimento, ocorre mesmo antes da superposição entre as diferentes bandas de Landau. Verificamos uma levitação linear no fator de preenchimento ocorrendo antes da superposição, para ambos os modelos de desordem, sendo que esta linearidade é afetada a partir do momento em que a superposição torna-se significativa.

Em resumo, a sistematização dos resultados numéricos obtidos permitiu a definição de expressões simples para o deslocamento dos estados estendidos em função da desordem, campo magnético ou larguras de bandas. Isto representa o preenchimento de uma importante lacuna no estudo da evolução dos estados delocalizados no limite de campo nulo. Trata-se da primeira análise numérica quantitativa para a levitação, que pode realimentar novos estudos, tanto no sentido de se obter o real diagrama de fases para o Efeito Hall Quântico, quanto na busca de uma explicação microscópica para o efeito de levitação.

Apêndice A

Alguns resultados experimentais sobre a levitação

Como discutido na seção 1.2.2, o Diagrama de Fases Global para o Efeito Hall Quântico Inteiro (figura (1.8-a)), baseado na proposta de levitação de estados estendidos, motivou uma série de investigações sobre esta questão de levitação. Em particular, foi inicialmente despertado o interesse na tentativa de se observar experimentalmente as previstas transições *Isolante Hall-Condutor 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, 19, 20], da maneira mostrada na Figura (A.1).

As linhas verticais pontilhadas na Figura (A.1) 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 nas regiões (1) e (3) o decréscimo de temperatura implica em aumento na resistência ρ_{xx} (comportamento característico de isolantes). A observação mais relevante é a transição entre as regiões (1) e (2), que seria explicada pela levitação de estados estendidos. Estas foram as primeiras observações de delocalização devida a campo magnético sofrida por um sistema isolante a $B=0$. Portanto estes experimentos [18, 19, 20] foram anunciados como estando de acordo com o Diagrama de Fases Global: sendo o sistema fortemente desordenado, as transições ocorrem na região

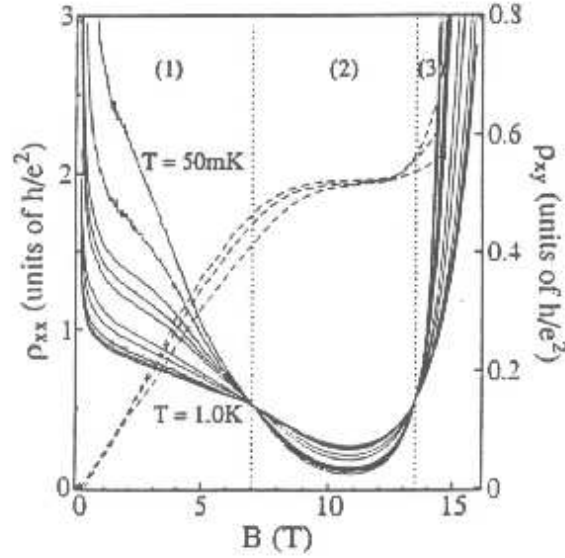


Figura A.1: Medidas de ρ_{xx} (linhas contínuas) e de ρ_{xy} (linhas tracejadas) em função de B , a temperaturas variando de 50 mK a 1.0 K. Conforme o campo magnético é reduzido, observam-se transições da região Isolante Hall (3) para o Condutor Hall Quântico (2) e novamente para o Isolante Hall (1).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

onde apenas o primeiro platô ($s_{xy} = 1$) é observado.

Entretanto, outros resultados obtidos posteriormente [25, 26, 27] com o mesmo tipo de experimento, apresentaram violações ao Diagrama Global e portanto à conjectura de levitação. Nestes outros experimentos, foram observadas transições diretas de platôs $s_{xy} > 1$ para o isolante. Tais transições diretas não são permitidas pelo diagrama proposto. No caso, por exemplo, em que se consiga definir até o 3^o platô, a redução do campo magnético deveria, segundo a proposta de levitação, ocasionar primeiramente a transição $s_{xy} = 3$ para $s_{xy} = 2$, depois $s_{xy} = 2$ para $s_{xy} = 1$, e finalmente $s_{xy} = 1$ para o isolante. Mas estas etapas não são observadas.

Uma outra forma utilizada em trabalhos experimentais para investigar a questão da levitação é acompanhar a que densidade eletrônica ocorrem os estados estendidos [17, 21, 23, 28]. Como vimos, quanto menor o campo magnético, menor a degenerescência das bandas de Landau (equação (1.7)). Se os estados estendidos seguissem sempre no centro das bandas,

a densidade de estados até a posição dos estados estendidos deveria diminuir linearmente com o campo. Fazendo medidas deste tipo, observa-se um desvio nesta linearidade conforme $B \rightarrow 0$; ou seja, os estados estendidos estariam “levitando”, como mostra a Figura (A.2).

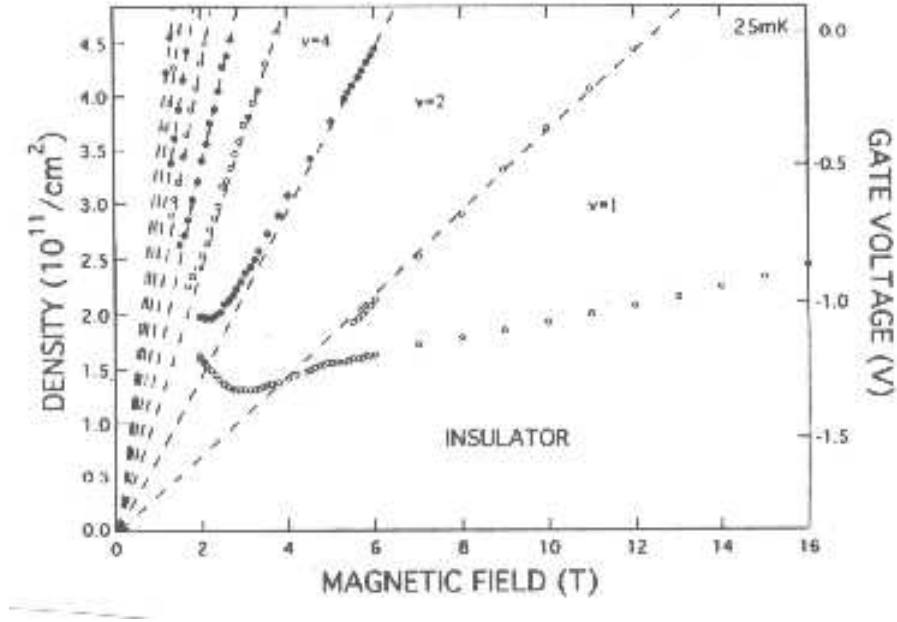


Figura A.2: Observação experimental de levitação do estado estendido da 1ª banda de Landau (algum desvio é observado também para a segunda banda). As linhas tracejadas representam os níveis de Landau. Para altos campos consegue-se resolver a degenerescência de spin da primeira banda. Retirada da referência [21].

A Figura (A.2) [21] é apresentada como clara evidência de levitação, sendo a primeira observação de que o estado estendido deslocar-se-ia em energia para além do nível de Fermi. Entretanto vale notar que a prevista levitação mais acentuada para os níveis mais altos não foi observada - pelo contrário: observa-se levitação mais acentuada para a primeira banda.

Outros trabalhos experimentais que fazem estudos semelhantes, mostram que após a levitação inicial (sempre mais acentuada para primeira banda), o estado estendido da primeira banda encontra o estado estendido da segunda banda, “fundindo-se” com este, e então eles passam a levitar juntos até encontrar o estado crítico da terceira banda, e assim sucessivamente. Este esquema de “encontro e fusão” de estados estendidos de diferentes bandas,

formando um limiar entre as fases *Isolante Hall* e *Líquido de Hall*, possibilita as transições diretas entre $s_{xy} > 1$ e a fase isolante, como mostra a Figura (A.3), publicada em um recente trabalho [28].

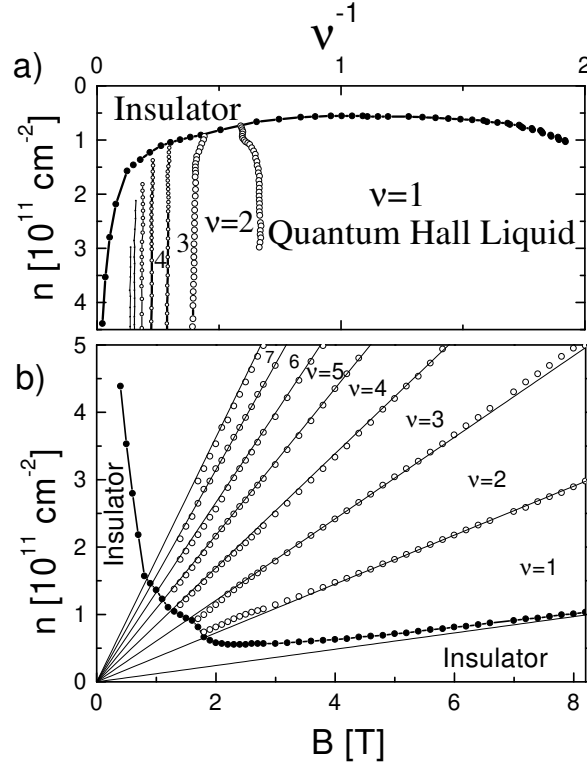


Figura A.3: (a) Proposta de diagrama de fases para o EHQL, baseada no resultado experimental de levitação e fusão de estados estendidos mostrado em (b). Figura retirada da referência [28].

Na Figura (A.3-b) é mostrado o mapeamento da densidade eletrônica até os estados estendidos, analogamente à Figura (A.2), porém aqui observa-se a levitação e fusão dos estados críticos na região de mais baixos campos magnéticos. Na parte (a) da Figura, os autores propõem um novo diagrama de fases para o EHQL, baseado em seus resultados experimentais. Outros diagramas similares, que permitem transições diretas $s_{xy} > 1$ para o isolante, haviam sido também sugeridos em outros trabalhos experimentais [20, 23, 24, 25, 26].

Apêndice B

Alguns resultados analíticos sobre a levitação

Há um número restrito de trabalhos analíticos abordando a questão da levitação (apenas cinco) [14] e [39] a [42]. Apesar de todos eles identificarem algum tipo de levitação em energia para os estados estendidos, ainda não existe nenhum consenso quanto à forma da expressão para esta levitação.

De um modo bastante geral, pode-se dizer que o procedimento adotado por estes trabalhos é considerar a introdução do efeito de mistura entre diferentes níveis de Landau, mostrando que isso implica em um deslocamento dos estados estendidos para mais altas energias. No limite em que a separação entre os níveis de Landau ($\hbar\omega_c$) tende a infinito, não ocorre mistura entre os diferentes níveis. Nesse caso, e para potenciais suaves (potenciais de longo alcance), pode-se desacoplar o movimento ciclotrônico do movimento dos centros das órbitas dos elétrons. Assim, este último movimento pode ser tratado semiclassicamente, considerando que os elétrons movam-se ao longo de equipotenciais (do potencial bidimensional desordenado $V(r)$). Neste limite, a delocalização dos estados eletrônicos é associada com a percolação das linhas equipotenciais, sendo que a energia crítica em que as equipotenciais percolam é determinada pelos potenciais nos pontos de cela: [61, 62]. Pode-se então, a partir deste quadro, tratar perturbativamente os efeitos de mistura entre níveis de Landau. A descrição detalhada da abordagem analítica e dos modelos utilizados nestes trabalhos foge ao escopo desta tese. Vamos aqui nos deter a mencionar os principais resultados obtidos, discutindo algumas de

suas implicações.

Os primeiros trabalhos a fazer cálculos nesta direção [39, 40] identificaram para os estados delocalizados um deslocamento para mais altas energias; entretanto não apresentam uma expressão para definir como se dá esta levitação. Na referência [39], os autores ainda sugerem que a magnitude de levitação seria independente do índice do nível de Landau.

Depois, Gramada e Raikh [41] estimaram a dependência da levitação em energia (δE) do primeiro nível de Landau com o campo magnético como sendo $\delta E \propto 1/B^4$ (ou seja, $\delta E/\hbar\omega_c \propto 1/B^5$).

Haldane e Yang [42] apresentam resultados interessantes, propondo uma expressão mais elaborada para definir a levitação. Em seus cálculos perturbativos encontram que o primeiro termo de correção ao modelo sem mistura ($\hbar\omega_c \rightarrow \infty$), da ordem de $1/B^2$, tem o efeito de reduzir a energia de todos os estados da banda (repulsão de níveis). Entretanto, a observação importante feita por eles foi que este efeito anula-se nos pontos de cela do potencial, ou seja, não há redução em energia para os estados estendidos. A próxima ordem de correção ($1/B^3$) atua nos pontos de cela, agora com uma contribuição positiva em energia. Este comportamento, que dá origem à levitação dos estados estendidos, é esquematizado na Figura (B.1).

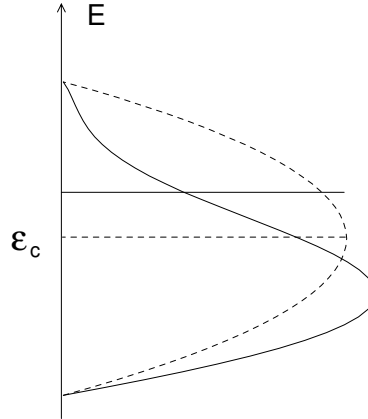


Figura B.1: Resultado de Haldane e Yang [42]. *Linhas tracejadas:* Densidade de estados, mostrando estados estendidos centralizados, para uma dada banda de Landau, sem considerar efeitos de mistura entre níveis. *Linhas contínuas:* Considerando a mistura entre níveis, a densidade de estados como um todo sofre afundamento em energia, entretanto apenas os estados estendidos têm deslocamento para mais altas energias.

A expressão para a levitação obtida por Haldane e Yang é:

$$\delta E = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c \left(\frac{l_B}{\lambda}\right)^4 \frac{1}{(\omega_c \tau)^2} \quad (\text{B.1})$$

onde $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ é o comprimento magnético; λ é o comprimento de correlação do potencial desordenado $V(r)$; e $\hbar/\tau$ é definido como sendo a variância das flutuações de $V(r)$. Portanto, por esta definição, $\hbar/\tau$ é equivalente ao W (largura das flutuações) considerado nos modelos numéricos.

Assim, a equação (B.1) pode ser reescrita na forma:

$$\frac{\delta E}{\hbar \omega_c} \propto \left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{1}{\lambda^4} \frac{W^2}{B^4} \quad (\text{B.2})$$

Por fim, Haldane e Yang enfatizam que o tratamento perturbativo que utilizam é válido somente quando o campo magnético é forte, onde as bandas estão bem separadas e a mistura entre níveis de Landau é fraca. Portanto não é descartada a possibilidade de outros cenários ainda se manifestarem na região de baixos campos magnéticos.

Finalmente, há o trabalho de Fogler [14], que estende os resultados de Haldane e Yang até mais baixos campos magnéticos, usando teoria de perturbação puramente clássica. Para o caso de potencial suave (correlacionado), Fogler encontra a relação:

$$\frac{\delta E}{\hbar \omega_c} \propto \left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{1}{\omega_c \tau} \quad (\text{B.3})$$

sendo que aqui τ é tomado da maneira usual (do mesmo modo considerado por Laughlin [11] e Khmelnitskii [12]), como sendo o tempo de espalhamento elástico do elétron, de modo que $\tau \propto 1/W^2$. Assim a expressão de Fogler é equivalente a:

$$\frac{\delta E}{\hbar \omega_c} \propto \left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{W^2}{B} \quad (\text{B.4})$$

Fogler concluiu ainda que $\delta E/\hbar \omega_c$, segundo seus cálculos, é sempre muito menor do que 1 e portanto esta levitação identificada é bem diferente da forte levitação prevista por Laughlin [11] e Khmelnitskii [12].

Bibliografia

- [1] K. von Klitzing, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 519 (1986)
- [2] D. C. Tsui, H. L. Stormer e A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1559 (1982)
- [3] L. J. Challis, *Comtemp. Phys.* **33**, 111 (1992); T. J. Thornton, *Rep. Progr. Phys.* **58**, 311 (1995)
- [4] H. Ibach e H. Luth, capítulo 12 de *Solid-state physics: an introduction to theory and experiment*, Berlin: Springer, 1991
- [5] W. Zawadzki, capítulo 13 de *Physics of Solids in Intense Magnetic Fields*, editado por E. D. Haidemenakis, *New York: Plenum Press*, 1969
- [6] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. B* **23**, 5632 (1981); R. E. Prange, *Phys. Rev. B* **23**, 4802 (1981); H. Aoki e T. Ando, *Solid State Commun.* **38**, 1079 (1981)
- [7] P. W. Anderson *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958)
- [8] B. Kramer e A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993); Y. Nagaoka, *Prog. Theor. Phys.* **84**, (1985); P. W. Anderson, *Rev. Mod. Phys.* **50**, 191 (1978)
- [9] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello e T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979)
- [10] B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* **25**, 2185 (1982)
- [11] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 2304 (1984)
- [12] D. E. Khmelnitskii, *Phys. Rev. Lett.* **106A**, 182 (1984)

- [13] H. Levine, S. B. Libby e A. M. M. Pruisken, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1915 (1983)
- [14] M. M. Fogler, *Phys. Rev. B* **57**, 11947 (1998)
- [15] S. Das Sarma, capítulo 1 de *Perspectives in Quantum Hall Effects*, editado por Sankar Das Sarma e Aron Pinzuk - *John Wiley Sons, Inc.*, 1997
- [16] S. Kivelson, D. H. Lee e S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **46**, 2223 (1992)
- [17] A. A. Shashkin, G. V. Kravchenko e V. T. Dolgoplov, *JETP Lett.* **58**, 220 (1993)
- [18] H. W. Jiang, C. E. Johnson, K. L. Wang e S. T. Hannahs, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1439 (1993)
- [19] T. Wang, K. P. Clark, G. F. Spencer, A. M. Mack e W. P. Kirk, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 709 (1994)
- [20] R. J. F. Hughes *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 4763 (1994)
- [21] I. Glozman, C. E. Johnson e H. W. Jiang, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 594 (1995)
- [22] J. E. Furneaux, S. V. Kravchenko, Whitney Mason, G. E. Bowker e V. M. Pudalov, *Phys. Rev. B* **51**, 17227 (1995)
- [23] S. V. Kravchenko, Whitney Mason, J. E. Furneaux e V. M. Pudalov, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 910 (1995)
- [24] I. Glozman, C. E. Johnson e H. W. Jiang, *Phys. Rev. B* **52**, R14348 (1995)
- [25] D. Shahar, D. C. Tsui e J. E. Cunningham, *Phys. Rev. B* **52**, R14372 (1995)
- [26] S.-H. Song, D. Shahar e D. C. Tsui, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2200 (1997)
- [27] C. H. Lee, Y. H. Chang, Y. W. Suen e H. H. Lin, *Phys. Rev. B* **58**, 10629 (1998)
- [28] M. Hilke, D. Shahar, S.-H. Song, D. C. Tsui e Y. H. Xie, *Phys. Rev. B* **62**, 6940 (2000)
- [29] D. Z. Liu, X. C. Xie e Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 975 (1996)
- [30] K. Yang e R. N. Bhatt, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1316 (1996)

- [31] X. C. Xie, D. Z. Liu, B. Sundaram e Q. Niu, *Phys. Rev. B* **54**, 4966 (1996)
- [32] D. N. Sheng e Z. Y. Weng, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 318 (1997)
- [33] D. N. Sheng e Z. Y. Weng, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 580 (1998)
- [34] K. Yang e R. N. Bhatt, *Phys. Rev. B* **59**, 8144 (1999)
- [35] Y. Morita, K. Ishibashi e Y. Hatsugai, *Phys. Rev. B* **61**, 15952 (2000)
- [36] D. N. Sheng, Z. Y. Weng e X. G. Wen, *ainda não publicado*: cond-mat/0003117
- [37] D. N. Sheng e Z. Y. Weng, *Phys. Rev. B* **62**, 15363 (2000)
- [38] Th. Koschny, H. Potempa e L. Schweitzer, *Phys. Rev. Lett* **86**, 3863 (2001)
- [39] T. V. Shahbazyan e M. E. Raikh, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 304 (1995)
- [40] V. Kagalovsky, B. Horovitz e Y. Avishai, *Phys. Rev. B* **52**, R17044 (1995)
- [41] A. Gramada e M. E. Raikh, *Phys. Rev. B* **54**, 1928 (1996)
- [42] F. D. M. Haldane e K. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 298 (1997)
- [43] B. Huckestein, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3141 (2000)
- [44] R. Peierls, *Z. Phys.* **80**, 763 (1933)
- [45] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **84**, 814 (1951)
- [46] E. Brown, *Phys. Rev.* **133**, (4A) 1038 (1964)
- [47] Greg Watson, *Contemp. Phys.* **37**, (2) 127 (1996)
- [48] utilizamos neste trabalho a sub-rotina F02HAF da biblioteca NAG (*Fortran Library Routine Document*), que computa todos os auto-valores e auto-vetores de uma matriz complexa e Hermitiana.
- [49] G. Bastard, J. A. Brum e R. Ferreira, *Sol. State Phys.* **44**, 229 (1991)
- [50] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, vol. 7 of *Solid-State Sciences* 2nd edition (Springer-Verlag, Heidelberg, 1990)

- [51] P. G. Harper, *Proc. Phys. Soc. London*, Sect. A **68**, 879 (1955)
- [52] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B*, **14**, 2239 (1976)
- [53] U. Sivan, Y. Imry e C. Hartzstein *Phys. Rev. B*, **39**, 1242 (1989)
- [54] B. Huckestein, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 357 (1995)
- [55] R. J. Bell e P. Dean, *Discuss. Faraday Soc.* **50**, 55 (1970)
- [56] D. J. Thouless, *Phys. Reports* **13**, 93 (1974)
- [57] F. Wegner, *Z. Phys.* **36**, 209 (1980)
- [58] T. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53**, 3126 (1984)
- [59] T. Ando e Y. Uemura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **36**, 959 (1974)
- [60] A. Potts *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 5189 (1996); J. P. Eisenstein *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 875 (1985)
- [61] S. A. Trugman, *Phys. Rev. B* **27**, 7539 (1983)
- [62] J. T. Chalker e P. D. Coddington, *J. Phys. C* **21**, 2665 (1988)