Fases Topológicas da Matéria

L. N. Queiroz Xavier

3 de agosto de 2021

Mesmo sendo compostos pela mesma molécula, o gelo, a água líquida e o vapor d'água apresentam propriedades macroscópicas bastante distintas. Por exemplo, sabemos pela experiência cotidiana que o gelo é menos denso que a água, e que ambos são mais densos que o vapor d'água. O que distingue essas três fases da matéria umas das outras são as diferentes formas nas quais as moléculas de água se organizam e interagem entre si. O vapor d'água tende a se dissipar no ar e, por um motivo similar, a água líquida escorre e se espalha se não for contida por um recipiente. No entanto, o gelo não costuma se despedaçar espontaneamente, mantendo sua forma compacta se deixado à pressão e temperatura constantes. Esses fenômenos podem ser interpretados considerando-se o ordenamento das moléculas de água em cada caso: em sua fase fluida, as moléculas da água interagem fracamente, o que por sua vez faz com que suas posições tenham correlação muito pequenas. O resultado é que, como as moléculas não possuem restrições às suas posições, podem se movimentar para praticamente qualquer lugar, preferencialmente para longe umas das outras. Isso não ocorre para a água em sua fase sólida, onde as moléculas ocupam sítios específicos em uma rede cristalina e interagem fortemente com suas vizinhas.

De acordo com o exemplo da água apresentado acima e como verificado em muitos outros sistemas físicos, as fases da matéria que um sistema pode apresentar são definidas pelas diferentes maneiras nas quais seus componentes podem interagir entre si. Isso estabelece uma noção de *ordem* no sistema, que pode ser descrita em termos de *simetrias*. Um sistema é simétrico se, quando estudado de pontos de vista diferentes, parece o mesmo. Por exemplo, o vapor d'água confinado em um recipiente isolado tende a preenchê-lo completamente, de forma homogênea. Se estivermos dentro do recipiente, andarmos qualquer distância em qualquer direção e medirmos a densidade de moléculas, sempre encontraremos, em média, o mesmo valor. O sistema possui, então, *simetria por translações contínuas*. Por outro lado, o gelo, sendo um sólido cristalino, possui apenas *simetria por translações discretas*,

ou seja, a densidade permanece a mesma apenas em certos pontos específicos do sistema, separados por uma distância característica.

A experiência cotidiana também nos mostra que, quando exposto a interações com o mundo externo, um sistema não fica eternamente em uma única fase. A água líquida evapora se deixada ao sol, enquanto que se transforma em gelo se resfriada a uma temperatura suficientemente baixa. O ordenamento das moléculas, então, muda com as variações de temperatura e pressão, alterando também as simetrias do sistema. Esse comportamento indica um método bastante natural, e que se mostrou extremamente eficaz, para classificar as fases da matéria. Dado um sistema, suas simetrias determinam completamente seus possíveis estados da seguinte forma: as simetrias de um sistema podem ser quantificadas em um objeto matemático chamado grupo, e as fases da matéria que um sistema com um dado grupo de simetria G pode exibir são, portanto, aqueles estados que possuem, como grupos de simetria associados, subgrupos de G. Por exemplo, suponha que um material possua simetria contínua sob rotações em três dimensões. Em outros estados, esse material possuirá simetria, por exemplo, sob rotações em torno de um eixo fixo, ou rotações discretas, etc. Assim, dado um sistema com um grupo de simetria G, os subgrupos de G classificam todas as suas fases possíveis.

As transições de fase causadas por variações de temperatura e pressão são bem conhecidas. No entanto, um sistema quântico pode sofrer transições de fase mesmo à temperatura zero. Nesse regime, as fases do sistema equivalem aos estados fundamentais da Hamiltoniana que o define. Por exemplo, o modelo de Ising em uma dimensão possui dois estados fundamentais possíveis: todos os spins alinhados em uma direção ou na outra. Cada um desses estados define uma fase quântica do modelo de Ising, e o sistema sofre uma transição de fase quântica quando vai de um estado fundamental a outro. A transição é caracterizada por um chamado ponto crítico, no qual a energia do estado fundamental não é analítica.

A classificação das fases da matéria através de grupos de simetria é conhecida como a teoria de Landau, e descreve com bastante precisão o que acontece a vários sistemas físicos, desde as transições de fase da água, a formação das estruturas cristalinas e materiais magnéticos a supercondutores e superfluidos. No entanto, a descoberta do efeito Hall quântico fracionário (FQHE, da sigla em inglês) [1] mostrou que nem todas as fases da matéria são passíveis de serem descritas pelo formalismo de Landau. No FQHE, diferentes fases quânticas possuem a mesma simetria, e não existem parâmetros de ordem (i.e., medidas) locais que as diferenciem. No entanto, medidas globais podem ser utilizadas para identificar cada fase. Esse caráter global, em contraste com as características locais das fases descritas pela teoria de Landau, rendeu a esses estados exóticos o nome de fases topológicas da matéria.

Neste texto, pretendemos estudar com profundidade as fases topológicas da matéria a partir de exemplos clássicos, abordando temas como sua origem, sua relação com as fases usuais, sua descrição e classificação e suas possíveis aplicações em tecnologias quânticas. Começaremos com uma revisão da teoria de Landau na seção 1. Em seguida, estudaremos o efeito Hall quântico fracionário e sua explicação teórica na seção 2, e veremos que sua descrição não é possível dentro do formalismo de Landau.

1 Transições de Fase Quânticas: a Teoria de Landau

Nesta seção, estudaremos o modelo de Ising. O modelo de Ising, inventado pelo físico Wilhelm Lenz em 1920 [2] e cuja versão unidimensional foi resolvida por seu aluno Ernst Ising em sua tese de doutorado [3], é definido por um sistema de spins-1/2 posicionados em sítios de uma rede discreta, que interagem apenas com seus vizinhos mais próximos, e foi criado para modelar materiais magnéticos, onde os átomos interagem entre si e com possíveis campos magnéticos externos através de seus momentos de dipolo magnético. Esse é o modelo mais simples que apresenta transições de fase, tanto clássicas (em $d \geq 2$ dimensões) quanto quânticas, como veremos a seguir. Podemos encontrar vários sistemas na natureza cujo comportamento pode ser descrito por um modelo de Ising. Por exemplo, em cristais de CoNb₂O₆, os íons de Co⁺⁺ apresentam um momento magnético que pode se alinhar tanto paralela quanto anti-paralelamente a um dado eixo cristalino. Mais ainda, os momentos magnéticos dos íons interagem apenas com seus vizinhos mais próximos. Assim, podemos codificar em cada íon de Co⁺⁺ um spin de Ising e, portanto, o comportamento magnético do cristal CoNb₂O₆ pode ser estudado através do modelo de Ising [4]. Pode-se também criar artificialmente, utilizando átomos ultra-frios e redes ópticas, sistemas físicos cujo comportamento é descrito por um modelo de Ising [5].

1.1 O Modelo de Ising

Vamos considerar um sistema de N spins-1/2 que habitam os sítios de uma rede discreta em d=1 dimensões com condições de fronteira periódicas, isto é, seu último sítio é identificado com o primeiro. Em cada sítio v, temos um espaço de Hilbert bidimensional \mathcal{H}_v gerado pelos dois estados de spin possíveis, i.e.,

$$\mathcal{H}_v = \operatorname{Span}_{\mathbb{C}}\{|+1\rangle_v, |-1\rangle_v\},$$

de modo que o espaço de Hilbert total do sistema, \mathcal{H} , é dado pelo produto tensorial

$$\mathcal{H} = \bigotimes_v \mathcal{H}_v,$$

e possui dimensão $dim(\mathcal{H}) = 2^N$. O modelo de Ising é definido pela Hamiltoniana

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - h\sum_{i=1}^N \sigma_i^z, \qquad (1.1.1)$$

onde a soma sobre $\langle i, j \rangle$ é uma soma sobre vizinhos mais próximos, i.e.,

$$\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z = \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z,$$

com $\sigma_{N+1}^z = \sigma_1^z$ devido à condição de fronteira periódica, σ_i^z , para todo i=1,...,N, é a matriz de Pauli usual que age no espaço de Hilbert existente no sítio i, J>0 é uma constante de interação entre vizinhos, muitas vezes chamada de constante de troca e h é uma constante que representa um campo magnético uniforme na direção z gerado por uma fonte externa. Vamos estudar a termodinâmica do sistema gerada pela Hamiltoniana (1.1.1)

A forma da Hamiltoniana (1.1.1) a torna facilmente diagonalizável. A base do espaço de Hilbert total é dada por todas as combinações possíveis das bases locais. Por exemplo, se N=2, a base de \mathcal{H} é o conjunto $\{|+1,+1\rangle,|+1,-1\rangle,|-1,+1\rangle,|-1,-1\rangle\}$. Em geral, um elemento arbitrário da base de \mathcal{H} pode ser escrito como

$$|\sigma\rangle = |\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_N\rangle$$

onde $\sigma_i = \pm 1$ para todo i = 1, ..., N. Como cada matriz σ^z é diagonal na base local, a Hamiltoniana será diagonal na base de \mathcal{H} construída acima, i.e.,

$$H|\sigma\rangle = E(\sigma)|\sigma\rangle,$$
 (1.1.2)

onde

$$E(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i.$$
 (1.1.3)

Dizemos que o modelo (1.1.1) é *clássico*; sua Hamiltoniana já é diagonal na base que escolhemos. De fato, quando estudamos o modelo de Ising

na mecânica estatística clássica, sempre tomamos como ponto de partida a energia (1.1.3). Podemos tornar o modelo de Ising quântico introduzindo um termo na Hamiltoniana que não comuta com as matrizes σ^z , como por exemplo o termo $-g\sum_{i=1}^N \sigma_i^x$, que representa um campo magnético externo perpendicular ao eixo dos spins, definindo o assim chamado modelo de Ising transverso. Mais tarde veremos que um termo dessa natureza torna possível o tunelamento dos spins de um estado a outro, tornando explícito o caráter quântico do modelo em questão.

Antes mesmo de estudarmos a termodinâmica do modelo de Ising, podemos fazer algumas afirmações sobre o sistema que ele representa. Para $h \ll J$, a energia (1.1.3) é minimizada quando todos os spins estão alinhados na mesma direção. Nesse limite o sistema é degenerado, com dois estados fundamentais possíveis:

$$|\psi_{\pm}\rangle = |\pm 1, \pm 1, ..., \pm 1\rangle.$$
 (1.1.4)

A Hamiltoniana (1.1.1), para h << J, é simétrica sob a transformação $\sigma_i^z \to -\sigma_i^z$, para todo i=1,...,N. Isto é, o sistema é simétrico sob a transformação que inverte a direção de todos os spins ao mesmo tempo. Tal simetria global é capturada pelo grupo multiplicativo $\mathbb{Z}_2 = \{-1,1\}$ e a transformação de simetria é dada pelo operador

$$X = \prod_{i=1}^{N} \sigma_i^x,$$

que claramente comuta com a Hamiltoniana. Como $X^2=\mathbb{1}$, seus autovalores são ± 1 . Portanto, o espaço de Hilbert se divide em dois setores: os estados com autovalor positivo de X e aqueles com autovalor negativo de X. Note que X leva um estado fundamental a outro, i.e., $X | \psi_{\pm} \rangle = | \psi_{\mp} \rangle$. Como o sistema deve estar em apenas um estado fundamental, temos uma quebra espontânea de simetria. Para h >> J, os spins tendem a se alinhar ao campo magnético externo. Nesse caso, o sistema possui um único estado fundamental $|\psi_{\pm}\rangle$, dependendo se h é positivo ou negativo. A Hamiltoniana não possui mais uma simetria global \mathbb{Z}_2 , ou seja, ela foi explicitamente quebrada pelo campo magnético.

1.2 Transições de Fase do Modelo de Ising

Vamos utilizar a aproximação do *campo médio* para estudar as propriedades térmicas do modelo de Ising. Introduzimos os operadores de flutuação

$$\delta \sigma_i^z = \sigma_i^z - \langle \sigma_i^z \rangle, \tag{1.2.1}$$

que medem o desvio do operador de seu valor médio. Para um sistema com simetria por translações, a média $\langle \sigma_i^z \rangle$ é independente da posição i e podemos escrever $\langle \sigma_i^z \rangle = m$, onde m é uma constante. Então, para quaisquer sítios i e j, temos que

$$\sigma_i^z \sigma_j^z = (\delta \sigma_i^z + m) \left(\delta \sigma_j^z + m \right) = \delta \sigma_i^z \delta \sigma_j^z + m \left(\delta \sigma_i^z + \delta \sigma_j^z \right) + m^2.$$

Agora empregamos a aproximação do campo médio: assumimos que as flutuações são pequenas, isto é, $\delta\sigma_i^z << 1$. Assim, podemos desprezar o termo quadrático $\delta\sigma_i^z\delta\sigma_j^z$ e reescrever

$$\sigma_i^z \sigma_j^z \approx m^2 + m \left(\delta \sigma_i^z + \delta \sigma_j^z \right) = -m^2 + m \left(\sigma_i^z + \sigma_j^z \right).$$

Daí, a (1.1.1) é aproximada pela Hamiltoniana

$$H \approx -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-m^2 + m \left(\sigma_i^z + \sigma_j^z \right) \right] - h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z.$$
 (1.2.2)

Agora, como

$$\sum_{i=1}^{N} (-m^2) = -Nm^2,$$

e também

$$-Jm\sum_{i=1}^{N} (\sigma_{i}^{z} + \sigma_{i+1}^{z}) = -2Jm\sum_{i=1}^{N} \sigma_{i}^{z},$$

temos finalmente que

$$H \approx JNm^2 - h_{eff} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^z, \qquad (1.2.3)$$

onde

$$h_{eff} = 2Jm + h. (1.2.4)$$

Ou seja, a aproximação do campo médio reduz o modelo de Ising a um modelo de spins não-interagentes na presença de um campo magnético efetivo h_{eff} . No entanto, o campo efetivo depende de $m=\langle\sigma_i^z\rangle$ e então o problema é auto-consistente. Vamos estabelecer suas propriedades termodinâmicas. A função de partição é dada por

$$Z = tr\left(e^{-\beta H}\right),\tag{1.2.5}$$

onde $\beta = 1/k_BT$, T é a temperatura e $k_B = 1.380649 \times 10^{23} J/K$ é a constante de Boltzmann. A partir de agora, vamos sempre tomar $k_B = 1$, i.e., medimos temperaturas em unidades de energia. Calculando Z para a (1.2.3), temos que

 $Z = e^{-\beta J N m^2} tr \left(e^{\beta h_{eff} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^z} \right).$

Como cada termo no expoente da exponencial comuta, podemos escrevê-la como o produto

$$e^{\beta h_{eff} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^z} = \prod_{i=1}^{N} e^{\beta h_{eff} \sigma_i^z}.$$

Assim, podemos dividir o traço $tr\prod_{i=1}^N e^{\beta h_{eff}\sigma_i^z}$ em traços parciais sobre cada sítio:

$$tr\prod_{i=1}^{N}e^{\beta h_{eff}\sigma_{i}^{z}}=tr_{1}\left(tr_{2}\left(...tr_{N}\left(\prod_{i=1}^{N}e^{\beta h_{eff}\sigma_{i}^{z}}\right)...\right)\right),$$

e temos que

$$tr_N \prod_{i=1}^{N} e^{\beta h_{eff}\sigma_i^z} = \prod_{i=1}^{N-1} e^{\beta h_{eff}\sigma_i^z} tr_N e^{\beta h_{eff}\sigma_N^z}.$$

Como

$$tr_N e^{\beta h_{eff} \sigma_N^z} = \langle +1|_N e^{\beta h_{eff} \sigma_N^z} | +1 \rangle_N + \langle -1|_N e^{\beta h_{eff} \sigma_N^z} | -1 \rangle_N$$
$$= e^{-\beta h_{eff}} + e^{\beta h_{eff}} = 2 \cosh(\beta h_{eff}),$$

segue que

$$tr_N \prod_{i=1}^{N} e^{\beta h_{eff} \sigma_i^z} = 2 \cosh(\beta h_{eff}) \prod_{i=1}^{N-1} e^{\beta h_{eff} \sigma_i^z}.$$

Assim, calculando todos os traços parciais, temos que

$$Z = e^{-\beta J N m^2} \left[2 \cosh(\beta h_{eff}) \right]^N. \tag{1.2.6}$$

Agora, calculando a energia livre

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln(Z),$$

temos que

$$F = JNm^2 - \frac{N}{\beta} \ln \left[2\cosh(\beta h_{eff}) \right], \qquad (1.2.7)$$

e a energia livre por sítio f = F/N é dada por

$$f = Jm^2 - \frac{1}{\beta} \ln \left[2\cosh(\beta h_{eff}) \right]. \tag{1.2.8}$$

Vamos estudar a magnetização

$$m = -\frac{\partial f}{\partial h}.$$

Temos que

$$m = \tanh(\beta h + 2\beta J m), \tag{1.2.9}$$

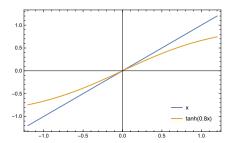
uma equação transcendente que depende do parâmetro β (assumimos que J está fixo). Para analisar o comportamento da magnetização através dessa equação, vamos considerar o caso em que o campo magnético externo h=0 e m<<1. Assim, podemos aproximar

$$\tanh(2\beta Jm) \approx 2\beta Jm.$$

Comparando então os gráficos das funções f(m)=m e $g(m)=2\beta Jm$, vemos que, quando $2\beta J<1$, a reta $2\beta Jm$ está sempre abaixo da reta m, e isso vale mesmo fora da vizinhança $m\neq 0$, onde a tangente hiperbólica se aproxima de sua reta assintótica sem cruzar com a reta m. Nesse caso, o único ponto de intersecção entre m e $\tanh(2\beta Jm)$ é m=0, como exemplificado na figura 1, e assim a equação (1.2.9) possui apenas uma solução. Para $2\beta J>1$ no entanto, a reta $2\beta Jm$ está sempre acima da reta m. Fora da região $m\approx 0$, a tangente hiperbólica se aproxima de suas retas assintóticas dadas por $y=\pm 1$, o que significa que $\tanh(2\beta Jm)$ deve interceptar a reta m em dois pontos para algum |m|>0, como exemplificado na figura 2. Nesse caso, então, temos duas soluções possíveis para a equação (1.2.9), refletindo dois regimes de magnetização possíveis. Como $2\beta J=1$ separa dois comportamentos diferentes do sistema, temos uma transição de fase nesse ponto. A temperatura crítica na qual a transição ocorre é

$$T_c = 2J.$$
 (1.2.10)

A fase onde m=0, que ocorre quando $T>T_c$, é chamada paramagnética, ou desordenada. Os spins estão totalmente desalinhados por causa das fortes flutuações térmicas causadas pela alta temperatura. A fase onde $m=\pm m_0$, onde $m_0>0$ é uma constante, é chamada ferromagnética, ou ordenada, e ocorre quando $T< T_c$. A baixa temperatura não é capaz de gerar flutuações térmicas fortes o suficiente para desalinhar os spins, que estão totalmente



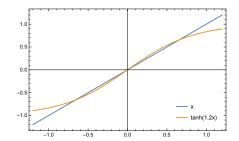


Figura 1: Solução da (1.2.9) para $2\beta J < 1$.

Figura 2: Solução da (1.2.9) para $2\beta J > 1$.

alinhados em uma das possíveis direções. Partindo de uma temperatura $T > T_c$ e diminuindo-a até chegar em uma temperatura $T < T_c$, o sistema sofre uma magnetização espontânea, i.e., que não é causada por um campo magnético externo. Mais ainda, acontece uma quebra espontânea de simetria nessa transição: para $T > T_c$, como os spins estão alinhados aleatoriamente, o comportamento do sistema não muda se invertermos todos os spins, pois estes continuarão apontando em direções aleatórias, e temos então uma simetria \mathbb{Z}_2 . No entanto, para $T < T_c$, os spins estão alinhados em apenas uma direção, e se invertermos todos os spins o comportamento do sistema mudará. A simetria foi quebrada espontaneamente.

O efeito de um campo magnético externo $h \neq 0$ é um desvio na magnetização: a fase de alta temperatura, nesse caso, possui magnetização não-nula, pois os spins tendem a se alinhar na direção do campo. Dizemos que o campo h quebra explicitamente a simetria da fase paramagnética. Com $h \neq 0$, a magnetização também nunca se anula na fase de baixa temperatura, pelo mesmo motivo. Um campo suficientemente forte (h >> J) pode fazer com que o sistema apresente apenas uma fase magnetizada, com todos os spins alinhados na direção de h. Podemos fazer uma analogia com a termodinâmica usual: h seria a pressão, a ação de uma força externa, enquanto m seria o volume, a resposta do sistema ao estímulo.

Agora, vamos estudar a energia livre (1.2.8). Podemos utilizar a (1.2.10) para reescrever f:

$$f = \frac{1}{2}T_c m^2 - T \ln \left[2 \cosh \left(\frac{h}{T} + \frac{T_c}{T} m \right) \right]. \tag{1.2.11}$$

Vamos considerar o caso h = 0. Como a fase paramagnética possui magnetização nula, perto de T_c , m << 1, o que significa que podemos expandir

$$\cosh\left(\frac{T_c}{T}m\right) \approx 1 + \frac{1}{2}\left(\frac{T_c}{T}m\right)^2,$$

$$\ln\left[2\cosh\left(\frac{T_c}{T}m\right)\right] \approx \ln(2) + \frac{1}{2}\left(\frac{T_c}{T}m\right)^2 - \frac{1}{8}\left(\frac{T_c}{T}m\right)^4.$$

Daí, perto de T_c , a energia livre é aproximadamente dada por

$$f \approx \frac{T_c}{2}m^2 - \frac{T_c^2}{T}m^2 + \frac{T_c^4}{8T^3}m^4 - T\ln 2$$
$$= \frac{T_c}{2T}(T - T_c)m^2 + \frac{T_c^4}{8T^3}m^4 - T\ln 2.$$

Desprezando a constante $T \ln 2$, temos então que

$$f \approx \frac{a}{2}m^2 + \frac{b}{4}m^4 \tag{1.2.12}$$

perto de T_c , onde

$$a = \frac{T_c}{T} \left(T - T_c \right), \tag{1.2.13}$$

$$b = \frac{T_c^4}{2T^3}. (1.2.14)$$

Note que b > 0 para qualquer valor de temperatura. No entanto, a > 0 para $T > T_c$ e a < 0 para $T < T_c$. Assim, para $T > T_c$, a energia livre possui um único mínimo no ponto m = 0 (figura 3), enquanto que para $T < T_c$, f possui dois mínimos (figura 4). Os extremos de f são soluções da equação

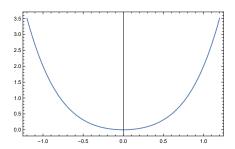
$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0,$$

isto é,

$$T_c m - T_c \tanh\left(\frac{T_c}{T}m\right) = 0 \Leftrightarrow m = \tanh\left(\frac{T_c}{T}m\right),$$

ou seja, cada mínimo de f corresponde a uma fase do modelo de Ising, um resultado esperado pois os estados de equilíbrio são aqueles que minimizam a energia livre.

Assim, a energia livre em função da magnetização define as fases do sistema através de seus mínimos. Esses pontos de extremo são regulados pelos parâmetros a e b, dados pelas (1.2.13) e (1.2.14), que por sua vez dependem dos parâmetros da Hamiltoniana e da temperatura. Esse comportamento é bastante geral: dado um sistema físico de muitos corpos que passa por transições de fase, podemos encontrar, próximo ao ponto crítico, uma expansão polinomial da energia livre em função do chamado parâmetro de ordem do sistema, um observável local, medido de ponto a ponto, que assume valores



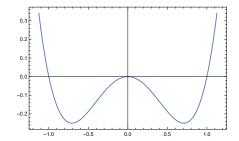


Figura 3: Energia livre (1.2.12) para $T > T_c$.

Figura 4: Energia livre (1.2.12) para $T < T_c$.

diferentes em cada fase que o sistema apresenta, podendo portanto ser utilizado para identificar cada estado. Os pontos críticos da energia livre nessa expansão indicam as diferentes fases que o sistema pode apresentar.

Note ainda que a energia livre (1.2.12) respeita a simetria da Hamiltoniana (1.1.1) quando h=0, ou seja, é invariante sob a transformação $m \to -m$. No entanto, próximo ao ponto crítico, para $T < T_c$, o estado de equilíbrio do sistema é um dos mínimos da energia livre, mostrados na figura 4. Podemos encontrar a magnetização nesse caso:

$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0 \Leftrightarrow am + bm^3 = 0 \Leftrightarrow m = \pm \sqrt{\frac{-a}{b}}.$$

Como $a = T_c(T - T_c)/T < 0$, segue que

$$m = \pm \frac{\sqrt{2}T}{T_c} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/2}.$$

Assim, se o sistema estiver, por exemplo, no estado com magnetização negativa, não pode passar para o estado com magnetização positiva sem superar uma grande barreira de energia, como mostra a figura 4. Assim, a simetria $m \to -m$ não é respeitada pelo estado do sistema, isto é, foi espontaneamente quebrada. Desse modo, os gráficos da energia livre mostrados nas figuras 3 e 4 mostram a quebra espontânea da simetria do sistema que ocorre na transição de fase. Este é mais um resultado geral: uma transição de fase é sinalizada por uma quebra espontânea de simetria, isto é, o sistema se torna menos simétrico após uma mudança de estado. Toda essa discussão baseada na (1.2.12), conhecida como energia livre de Landau, é chamada de teoria de Landau (ou fenomenologia de Landau) das transições de fase, e é a base do estudo das transições de fase de grande parte dos sistemas físicos conhecidos, desde mudanças de estado líquido \rightarrow sólido a supercondutores e superfluidos.

1.3 O Modelo de Ising Transverso

Como comentado anteriormente, o modelo de Ising (1.1.1) é dito clássico, pois sua Hamiltoniana é diagonal na base de \mathcal{H} . Podemos considerar uma versão quântica do modelo adicionando um campo magnético na direção transversal aos spins. Assim, definimos a Hamiltoniana do modelo de Ising transverso como sendo

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - h\sum_{i=1}^N \sigma_i^z - g\sum_{i=1}^N \sigma_i^x, \qquad (1.3.1)$$

onde g representa a intensidade do campo magnético externo aplicado na direção x. Como o termo

$$-g\sum_{i=1}^{N}\sigma_{i}^{x}$$

não comuta com os outros operadores presentes na Hamiltoniana, H não é trivialmente diagonalizada pela base de \mathcal{H} .

Vamos utilizar a aproximação do campo médio para reescrever os dois primeiros termos da Hamiltoniana. Temos que

$$H \approx JNm^2 - \sum_{i=1}^{N} \left(h_{eff} \sigma_i^z + g \sigma_i^x \right), \tag{1.3.2}$$

onde $h_{eff} = 2Jm + h$. Como $T_c = 2J$, escrevemos

$$H \approx \frac{NT_c m^2}{2} - \sum_{i=1}^{N} \left((T_c m + h) \sigma_i^z + g \sigma_i^x \right).$$

Temos uma Hamiltoniana que descreve um sistema de N spins não interagentes na presença de um campo magnético com componentes não-nulas em duas direções. Considere então o caso N=1. Seja U a matriz unitária que diagonaliza o termo

$$M = -(T_c m + h)\sigma^z - g\sigma^x = \begin{pmatrix} -(T_c m + h) & -g \\ -g & (T_c m + h) \end{pmatrix}.$$

Então, é fácil ver que

$$U^{\dagger}MU = \begin{pmatrix} \sqrt{(T_c m + h)^2 + g^2} & 0\\ 0 & -\sqrt{(T_c m + h)^2 + g^2} \end{pmatrix},$$

isto é,

$$U^{\dagger}MU = \sqrt{(T_c m + h)^2 + g^2}\sigma^z.$$

É possível encontrar uma forma explícita para U, que no caso é dada por

$$U = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma^y},$$

com $\tan(\theta) = g/(T_c m + h)$, isto é, é uma rotação no eixo y. Para diagonalizar a Hamiltoniana de N spins, então, utilizamos a rotação global

$$U = e^{-i\frac{\theta}{2}\sum_{i=1}^{N} \sigma_i^y},$$

e então

$$U^{\dagger}HU \approx \frac{NT_c m^2}{2} - \sqrt{(T_c m + h)^2 + g^2} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^z.$$

Daí, para calcular a função de partição, note que

$$Z = \operatorname{tr}(e^{-\beta H}) = \operatorname{tr}(e^{-\beta H}UU^{\dagger}) = \operatorname{tr}(U^{\dagger}e^{-\beta H}U) = \operatorname{tr}(e^{-\beta U^{\dagger}HU}),$$

ou seja,

$$Z = e^{-\beta \frac{NT_c m^2}{2}} \left[2\cosh(\beta \sqrt{(T_c m + h)^2 + g^2}) \right]^N,$$
 (1.3.3)

e a energia livre por spin é igual a

$$f = \frac{T_c m^2}{2} - T \ln \left[2 \cosh \left(\beta \sqrt{(T_c m + h)^2 + g^2} \right) \right].$$
 (1.3.4)

Note que, quando g=0, recuperamos a (1.2.8). Calculando a magnetização na direção z,

$$m = -\frac{\partial f}{\partial h},$$

temos que

$$m = \frac{(h + T_c m)}{\sqrt{(h + T_c m)^2 + g^2}} \tanh(\beta \sqrt{(h + T_c m)^2 + g^2}).$$
 (1.3.5)

Vamos considerar o caso em que h=0 e $T\to 0$. Nesse regime, a tangente hiperbólica se aproxima da unidade e a (1.3.5) se torna

$$m = \frac{T_c m}{\sqrt{(T_c m)^2 + g^2}}. (1.3.6)$$

Claramente, m=0 é uma solução. No caso em que $m\neq 0$, temos que

$$1 = \frac{T_c}{\sqrt{(T_c m)^2 + g^2}},$$

ou seja,

$$m = \pm \left(1 - \frac{g^2}{T_c^2}\right)^{1/2}. (1.3.7)$$

Temos então um ponto crítico em $g=g_c=T_c$. Para $g< g_c, \ g/T_c<1$ e a (1.3.7) é bem definida nos números reais. Em $g=g_c, \ m=0$ e continua assim para $g>g_c$. A transição de fase que ocorre no ponto $g=g_c$ é causada puramente por efeitos quânticos, visto que estamos considerando $T\to 0$. Ou seja, aqui temos um exemplo de uma transição de fase quântica. Como $T_c=2J$, podemos interpretar esse resultado do seguinte modo: para g<2J, a interação entre spins é mais forte que o campo magnético aplicado na direção transversal, e o sistema se comporta como um modelo de Ising regular. O estado fundamental é aquele no qual todos os spins apontam na mesma direção ao longo do eixo z. No entanto, para g>2J, temos o contrário; o campo magnético g é mais intenso que a interação entre os spins, que agora tendem a se alinhar ao longo do eixo x, resultando em uma magnetização total nula na direção z. O estado fundamental é aquele no qual os spins estão alinhados ao campo transversal.

Como a magnetização na direção z se anula quando o campo g é mais intenso que a interação entre spins, é de se esperar que, nesse regime, surja uma magnetização não-nula μ na direção x. Tal quantidade pode ser calculada a partir da expressão

$$\mu = -\frac{\partial f}{\partial g}.$$

Então, derivando f com respeito a g, temos que

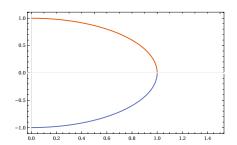
$$\mu = \frac{g}{\sqrt{(T_c m + h)^2 + g^2}} \tanh(\beta \sqrt{(T_c m + h)^2 + g^2}).$$
 (1.3.8)

Novamente, vamos tomar o caso em que h=0 e $T\to 0$. Temos que

$$\mu = \frac{g}{\sqrt{(T_c m)^2 + g^2}}. (1.3.9)$$

Quando m = 0, $\mu = 1$. Para m dado pela (1.3.7), temos que

$$\mu = \frac{g}{\sqrt{T_c^2 \left(1 - \frac{g^2}{T_c^2}\right) + g^2}} = \frac{g}{\sqrt{T_c^2 - g^2 + g^2}} = \frac{g}{T_c} = \frac{g}{g_c}.$$



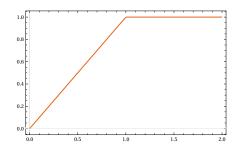


Figura 5: Magnetização na direção z em função de g/g_c para $T \to 0$.

Figura 6: Magnetização na direção x em função de g/g_c para $T \to 0$.

Logo, para $g < g_c$, a magnetização na direção x cresce linearmente com g, até atingir $\mu = 1$ no ponto crítico $g = g_c$, como esperado. Finalmente, vamos escrever a energia livre de Landau e verificar que ela de fato indica toda a fenomenologia descrita acima. Para simplificar, tomamos o caso em que h = 0 e g > 0. Expandindo a (1.3.4) perto do ponto crítico (m << 1), temos primeiramente que

$$\sqrt{T_c^2 m^2 + g^2} = g \left(1 + \frac{T_c^2}{g^2} m^2 \right)^{1/2} \approx g \left(1 + \frac{T_c^2}{2g^2} m^2 \right),$$

e que

$$\begin{split} \cosh\left(\beta g\left(1+\frac{T_c^2}{2g^2}m^2\right)\right) &= \frac{1}{2}\left(e^{\beta g+\frac{T_c^2}{2gT}m^2}+e^{-\beta g-\frac{T_c^2}{2gT}m^2}\right) \\ &\approx \frac{1}{2}\left[e^{\beta g}\left(1+\frac{T_c^2}{2gT}m^2\right)+e^{-\beta g}\left(1-\frac{T_c^2}{2gT}m^2\right)\right] \\ &=\cosh(\beta g)+\frac{T_c^2}{2gT}m^2\mathrm{sinh}(\beta g) \\ &=\cosh(\beta g)\left[1+\frac{T_c^2}{2gT}m^2\mathrm{tanh}(\beta g)\right], \end{split}$$

e mais ainda,

$$\ln\left[2\cosh\left(\beta\sqrt{(T_cm+h)^2+g^2}\right)\right] = \ln(2) + \ln\left[\cosh\left(\beta\sqrt{(T_cm+h)^2+g^2}\right)\right]$$

$$\approx \ln(2) + \ln\left[\cosh(\beta g)\left[1 + \frac{T_c^2}{2gT}m^2\tanh(\beta g)\right]\right]$$

$$= \ln(2) + \ln(\cosh(\beta g)) + \ln\left[1 + \frac{T_c^2}{2gT}m^2\tanh(\beta g)\right]$$

$$\approx \ln(2) + \ln(\cosh(\beta g)) + \frac{T_c^2}{2gT}m^2\tanh(\beta g) - \frac{T_c^4}{8g^2T^2}m^4\tanh^2(\beta g).$$

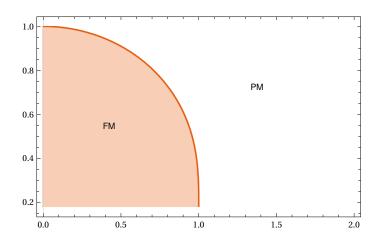


Figura 7: Diagrama de fase (T,g) do modelo de Ising transverso, dado pela equação (1.3.14). Para parâmetros dentro da região colorida, o sistema apresenta fase ferromagnética, enquanto que para parâmetros fora da região colorida, o sistema apresenta fase paramagnética.

Ou seja,

$$f \approx f_0 + \frac{a}{2}m^2 + \frac{b}{4}m^4 \tag{1.3.10}$$

com

$$f_0 = \ln(2\cosh(\frac{g}{T})), \tag{1.3.11}$$

$$a = T_c \left(1 - \frac{T_c}{g} \tanh(\frac{g}{T}) \right), \tag{1.3.12}$$

$$b = \left(\frac{T_c^4}{2g^2T} \tanh^2(\frac{g}{T})\right). \tag{1.3.13}$$

Note que b>0 sempre. Como no caso do modelo de Ising usual, a muda de sinal no ponto crítico, quando $g=T_c$, sinalizando uma transição de fase. Para a<0 ($g< T_c$), a energia livre possui dois mínimos, definidos pelas duas direções de magnetização na direção z possíveis. Para a>0 ($g>T_c$), a energia livre possui apenas um único mínimo, onde o sistema apresenta magnetização m=0, mas $\mu\neq 0$. A equação

$$g - T_c \tanh\left(\frac{g}{T}\right) = 0 \tag{1.3.14}$$

define completamente o diagrama de fase (T, g) do modelo de Ising transverso, mostrado na figura 7.

1.4 Entropia de Emaranhamento

Como o modelo de Ising transverso descreve um sistema quântico, pode ocorrer o fenômeno do emaranhamento, que também é utilizado para identificar uma transição de fase. Estados de sistemas de muitos corpos estão emaranhados quando não podem ser escritos como um estado-produto. Intuitivamente, isso significa que cada spin não é independente um do outro, ou seja, existe uma correlação entre eles. Tal correlação afeta a maneira como os spins se ordenam no material, o que por sua vez determina a fase em que o material está. Como o emaranhamento é uma característica quântica, mais uma vez vamos considerar $T \to 0$. Assim, as fases do modelo de Ising transverso são dadas pelos estados fundamentais de sua Hamiltoniana. Para simplificar, vamos sempre considerar h=0 na (1.3.1). Note que, para J>>g, os estados fundamentais possíveis são os estados-produto

$$|+1\rangle \otimes |+1\rangle \otimes ... \otimes |+1\rangle$$

ou

$$|-1\rangle \otimes |-1\rangle \otimes ... \otimes |-1\rangle$$
,

isto é, todos os spins alinhados em uma das duas direções possíveis. Tais estados não apresentam emaranhamento. Agora, caso J << g, existe apenas um estado fundamental possível:

$$|+\rangle \otimes |+\rangle \otimes ... \otimes |+\rangle$$
,

onde

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+1\rangle + |-1\rangle \right)$$

é auto-estado do operador σ^x . Sendo um estado-produto, este também não apresenta emaranhamento. Entretanto, observe que este último estado parece uma "mistura" dos dois estados fundamentais possíveis no regime J>>g. Então, no ponto crítico da transição da fase ferromagnética para a paramagnética, pode ser que o emaranhamento do estado fundamental seja não-nulo. Vamos mostrar que este é de fato o caso.

Podemos mapear a (1.3.1) em um modelo de $f\acute{e}rmions$ interagentes por meio da chamada $transformaç\~ao$ de Jordan-Wigner [6] (para uma revisão básica, consulte o apêndice A). Primeiramente, para facilitar nossa análise, vamos realizar uma rotação de $\pi/2$ em torno do eixo y nos operadores de Pauli, o que significa essencialmente fazer a troca $x \leftrightarrow z$ na (1.3.1), o que, por sua vez, sendo uma transformação unitária, não altera a física do modelo. Temos então a Hamiltoniana

$$H = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - g \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^z, \qquad (1.4.1)$$

agora com q < 0, por conveniência. Lembre-se que estamos considerando o sistema com condições de fronteira periódicas, isto é, $\sigma_{N+1}^x = \sigma_1^x$. Introduzindo os operadores

$$\sigma_n^+ = \frac{1}{2}(\sigma_n^x + i\sigma_n^y),\tag{1.4.2}$$

$$\sigma_n^- = \frac{1}{2}(\sigma_n^x - i\sigma_n^y),\tag{1.4.3}$$

que, em forma de matriz, são dados por

$$\sigma_n^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_n^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{1.4.4}$$

temos que

$$\sigma_n^x = \sigma_n^+ + \sigma_n^-, \tag{1.4.5}$$

$$\sigma_n^x = \sigma_n^+ + \sigma_n^-,$$
 (1.4.5)
 $\sigma_n^z = 2\sigma_n^+ \sigma_n^- - 1.$ (1.4.6)

Daí,

$$\sum_{i=1}^{N} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x = \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i^+ + \sigma_i^-)(\sigma_{i+1}^+ + \sigma_{i+1}^-)$$
 (1.4.7)

$$= \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^+ + \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+ + \sigma_i^- \sigma_{i+1}^-), \tag{1.4.8}$$

e também

$$\sum_{i=1}^{N} \sigma_i^z = \sum_{i=1}^{N} (2\sigma_i^+ \sigma_i^- - 1) = 2\sum_{i=1}^{N} \sigma_i^+ \sigma_i^- - N.$$
 (1.4.9)

Assim, ignorando o termo constante -gN, a (1.4.1) pode ser escrita como

$$H = -J\sum_{i=1}^{N} (\sigma_{i}^{+}\sigma_{i+1}^{+} + \sigma_{i}^{+}\sigma_{i+1}^{-} + \sigma_{i}^{-}\sigma_{i+1}^{+} + \sigma_{i}^{-}\sigma_{i+1}^{-}) - 2g\sum_{i=1}^{N} \sigma_{i}^{+}\sigma_{i}^{-}. \quad (1.4.10)$$

Agora, vamos utilizar a transformação de Jordan-Wigner (A.1) (e sua inversa (A.17)) para reescrever a (1.4.10) em termos de operadores fermiônicos. Temos que

$$\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^+ = \left[\prod_{n=1}^{i-1} e^{i\pi c_n^{\dagger} c_n} \right] c_i^{\dagger} \left[\prod_{m=1}^{i+1-1} e^{i\pi c_m^{\dagger} c_m} \right] c_{i+1}^{\dagger}. \tag{1.4.11}$$

Utilizando a propriedade (A.15), segue que

$$\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^+ = c_i^\dagger e^{i\pi c_i^\dagger c_i} c_{i+1}^\dagger. \tag{1.4.12}$$

Multiplicando pela direita os dois lados da equação acima por $e^{i\pi c_i^{\dagger}c_i}=-\sigma_i^z$, temos que

$$\sigma_i^+(-\sigma_i^z)\sigma_{i+1}^+ = c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger. \tag{1.4.13}$$

Como

$$\sigma^{+}(-\sigma^{z}) = -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \sigma^{+}, \tag{1.4.14}$$

segue imediatamente que

$$\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^+ = c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger. \tag{1.4.15}$$

Do mesmo modo, temos que

$$\sigma_{i}^{+}\sigma_{i+1}^{-} = \left[\prod_{n=1}^{i-1} e^{i\pi c_{n}^{\dagger} c_{n}}\right] c_{i}^{\dagger} \left[\prod_{m=1}^{i+1-1} e^{i\pi c_{m}^{\dagger} c_{m}}\right] c_{i+1}$$

$$= c_{i}^{\dagger} e^{i\pi c_{i}^{\dagger} c_{i}} c_{i+1}$$

$$= c_{i}^{\dagger} c_{i+1}. \qquad (1.4.16)$$

Mais ainda, sabendo que $\sigma^-\sigma^z=\sigma^-$, temos

$$\sigma_i^- \sigma_{i+1}^+ = -c_i c_{i+1}^\dagger = c_{i+1}^\dagger c_i, \tag{1.4.17}$$

$$\sigma_i^- \sigma_{i+1}^- = -c_i c_{i+1} = c_{i+1} c_i, \tag{1.4.18}$$

pois $\{c_i, c_j^{\dagger}\} = \delta_{ij}$ e $\{c_i, c_j\} = 0$. Logo, a (1.4.10) se torna

$$H = -\sum_{i=1}^{N} \left[J(c_i^{\dagger} c_{i+1} + c_{i+1}^{\dagger} c_i + c_i^{\dagger} c_{i+1}^{\dagger} + c_{i+1} c_i) + 2g c_i^{\dagger} c_i \right].$$
 (1.4.19)

Embora tudo pareça correto, ainda temos um problema para resolver. A condição de fronteira periódica faz com que o último termo da (1.4.10) seja igual a

$$-J(\sigma_N^+\sigma_1^+ + \sigma_N^+\sigma_1^- + \sigma_N^-\sigma_1^+ + \sigma_N^-\sigma_1^-) - 2g\sigma_N^+\sigma_N^-.$$
 (1.4.20)

Realizando a transformação de Jordan-Wigner no termo $\sigma_N^+\sigma_N^-$, temos como resultado o operador $c_N^\dagger c_N$, pois todos os operadores $(-\sigma^z)$ se cancelam. No entanto, isso não ocorre em um termo como $\sigma_N^+\sigma_1^+$. De fato, temos que

$$\sigma_N^+ \sigma_1^+ = \left[\prod_{n=1}^{N-1} e^{i\pi c_n^{\dagger} c_n} \right] c_N^{\dagger} c_1, \tag{1.4.21}$$

e não há nada que cancele o operador $\prod_{n=1}^{N-1} e^{i\pi c_n^\dagger c_n}$. Isso acontece para todos os termos envolvendo a interação do N-ésimo spin com o primeiro spin. Como isso ocorre apenas no último termo da soma, no limite termodinâmico $N \to \infty$, esse termo é desprezível e não precisamos nos preocupar com isso. Mas, para N finito, devemos ser capazes de lidar com esses termos. Para tanto, note que, como $\sigma^z\sigma^+=\sigma^+$, multiplicando os dois lados da (1.4.21) por $(-\sigma_N^z)$ pela esquerda, temos que

$$\sigma_N^+ \sigma_1^+ = - \left[\prod_{n=1}^N e^{i\pi c_n^{\dagger} c_n} \right] c_N^{\dagger} c_1. \tag{1.4.22}$$

Definimos então o operador número

$$\mathcal{N} = \sum_{i=1}^{N} c_i^{\dagger} c_i, \tag{1.4.23}$$

que mede o número total de férmions na cadeia. Utilizando esse operador, podemos escrever

$$\prod_{n=1}^{N} e^{i\pi c_n^{\dagger} c_n} = e^{i\pi \sum_{n=1}^{N} c_n^{\dagger} c_n} = e^{i\pi \mathcal{N}}, \qquad (1.4.24)$$

e, como $e^{i\pi} = -1$, podemos escrever ainda

$$\prod_{n=1}^{N} e^{i\pi c_n^{\dagger} c_n} = (-1)^{\mathcal{N}}.$$
(1.4.25)

O operador $(-1)^{\mathcal{N}}$ é conhecido como paridade. Sendo os auto-valores de \mathcal{N} números n=0,1,2,..., os auto-valores possíveis de $(-1)^{\mathcal{N}}$ são +1, quando há um número par de férmions na cadeia, e -1 quando há um número ímpar. Assim, a verdadeira forma da Hamiltoniana (1.4.19) é a seguinte:

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} \left[c_i^{\dagger} c_{i+1} + c_{i+1}^{\dagger} c_i + c_i^{\dagger} c_{i+1}^{\dagger} + c_{i+1} c_i \right] - 2g \sum_{i=1}^{N} c_i^{\dagger} c_i \qquad (1.4.26)$$
$$+J(-1)^{N} \left[c_N^{\dagger} c_1 + c_1^{\dagger} c_N + c_N^{\dagger} c_1^{\dagger} + c_1 c_N \right].$$

Vamos estudar a relação dos auto-estados de H com o operador de paridade. Temos que H e $(-1)^{\mathcal{N}}$ comutam. De fato, note que operadores do tipo $c_i^{\dagger}c_{i+1}$ criam uma partícula em i e destroem uma partícula em i+1, conservando o número total de partículas medido pelo operador \mathcal{N} . Agora, operadores do tipo $c_i^{\dagger}c_{i+1}^{\dagger}$ não conservam o número de partículas, criando uma excitação em i e outra em i+1. No entanto, como as partículas são criadas aos pares, seu número total sempre cresce de dois em dois. Como um número par mais dois continua par e um número ímpar mais dois continua ímpar, a paridade não muda. Um argumento similar pode ser feito para mostrar que operadores do tipo $c_{i+1}c_i$ comutam com a paridade. Segue então que

$$[H, (-1)^{\mathcal{N}}] = 0.$$

Isso significa que podemos diagonalizar simultaneamente H e $(-1)^{\mathcal{N}}$, e assim podemos dividir os auto-estados de energia entre dois setores diferentes, de acordo com os dois auto-valores possíveis de $(-1)^{\mathcal{N}}$. A Hamiltoniana, então, assume uma forma diagonal por blocos, onde cada setor possui uma paridade definida. Assim,

$$H = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix}, \tag{1.4.27}$$

onde

$$H_{\pm} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \left[c_i^{\dagger} c_{i+1} + c_{i+1}^{\dagger} c_i + c_i^{\dagger} c_{i+1}^{\dagger} + c_{i+1} c_i \right] - 2g \sum_{i=1}^{N} c_i^{\dagger} c_i \qquad (1.4.28)$$

$$\pm J \left[c_N^{\dagger} c_1 + c_1^{\dagger} c_N + c_N^{\dagger} c_1^{\dagger} + c_1 c_N \right].$$

Convencionando que $c_{N+1} = -c_1$ (condição de fronteira anti-periódica) no setor de paridade positiva e $c_{N+1} = c_1$ (condição de fronteira periódica) no setor de paridade negativa, podemos finalmente escrever

$$H_{\pm} = -J \sum_{i=1}^{N} \left[c_i^{\dagger} c_{i+1} + c_{i+1}^{\dagger} c_i + c_i^{\dagger} c_{i+1}^{\dagger} + c_{i+1} c_i \right] - 2g \sum_{i=1}^{N} c_i^{\dagger} c_i.$$
 (1.4.29)

Será importante para nossa discussão encontrar os auto-valores de energia do modelo. Por causa disso, vamos diagonalizar a Hamiltoniana (1.4.29), o que pode ser feito apenas no espaço de Fourier. Definimos então um novo conjunto de operadores $\{c_k\}$ a partir da transformação

$$c_j = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikj} c_k,$$
 (1.4.30)

isto é, tomamos a transformada de Fourier dos c_i 's para obter os novos operadores. Para determinar o conjunto no qual o índice k assume valores, vamos olhar para as condições de fronteira. No setor de paridade positiva, a condição $c_{N+1}=-c_1$ implica que

$$\sum_{k} e^{-ikN+1} c_k = -\sum_{k} e^{-ik} c_k,$$

isto é,

$$\sum_{k} e^{-ik} (e^{-ikN} + 1)c_k = 0$$

 $\forall k$, o que significa que

$$e^{-ikN} = -1.$$

Logo, nesse setor, k deve assumir valores no conjunto

$$K^{+} = \left\{ k = \pm (2l+1) \frac{\pi}{N}, \ l = 0, 1, 2, \dots \right\}.$$

Como existem exatamente N operadores c_i , também devem existir apenas N operadores c_k . Para cada l existem dois valores possíveis de k, o que significa que l deve assumir valores no conjunto $\{0, 1, ..., L/2 - 1\}$. Do mesmo modo, temos que no setor de paridade negativa, a condição $c_{N+1} = c_1$ implica que

$$\sum_{k} e^{-ikN+1} c_k = \sum_{k} e^{-ik} c_k,$$

isto é,

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k} e^{-ik} (e^{-ikN} - 1)c_k = 0$$

 $\forall k$, o que significa que

$$e^{-ikN} = 1.$$

Assim, nesse setor, k deve assumir valores no conjunto

$$K^{-} = \left\{ k = \pm 2l \frac{\pi}{N}, l = 0, 1, ..., \frac{L}{2} - 1 \right\}.$$

Antes de aplicar a transformada de Fourier nos termos da (1.4.29), precisamos estabelecer a seguinte propriedade:

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} e^{-i(k-q)j} = \delta_{kq}, \qquad (1.4.31)$$

que será essencial para os cálculos a seguir. De fato, seja $r=e^{-i(k-q)}$. Temos que

$$\sum_{j=1}^{N} e^{-i(k-q)j} = \sum_{j=1}^{N} r^{j} = \sum_{n=0}^{N-1} r^{n+1},$$

onde fizemos a mudança de variável n = j - 1. Temos então a soma dos N primeiros termos da série geométrica de razão r. Logo,

$$\sum_{i=1}^{N} e^{-i(k-q)j} = e^{-i(k-q)} \left(\frac{1 - e^{-i(k-q)N}}{1 - e^{-i(k-q)}} \right).$$

Para $k,q \in K^+$, com $k=\pm(2l+1)\pi/N$ e $q=\pm(2l'+1)\pi/N$, $e^{-i(k-q)N}=e^{\pm 2\pi i(l-l')}=1$, pois l-l' é inteiro. Logo, a soma é igual a zero, a menos que $k\to q$. Nesse limite, a razão $(1-e^{-i(k-q)N})/(1-e^{-i(k-q)})$ é indeterminada. Aplicando a regra de l'Hopital, obtemos que $(1-e^{-i(k-q)N})/(1-e^{-i(k-q)})\to N$ quando $k\to q$, o que justifica a (1.4.31).

Agora sim estamos prontos para transformar a (1.4.29). Utilizando a (1.4.30), temos que

$$\sum_{j=1}^{N} c_{j}^{\dagger} c_{j+1} = \sum_{k,q \in K^{\pm}} e^{-iq} \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} e^{-i(q-k)j} \right) c_{k}^{\dagger} c_{q},$$

e, utilizando a (1.4.31), segue que

$$\sum_{j=1}^{N} c_j^{\dagger} c_{j+1} = \sum_{k \in K^{\pm}} e^{-ik} c_k^{\dagger} c_k.$$

Tomando o adjunto dos dois lados dessa igualdade, temos que

$$\sum_{j=1}^{N} c_{j+1}^{\dagger} c_j = \sum_{k \in K^{\pm}} e^{ik} c_k^{\dagger} c_k.$$

Agora,

$$\sum_{j=1}^{N} c_{j+1} c_j = e^{-i\pi/2} \sum_{k,q \in K^{\pm}} e^{-ik} \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} e^{-i(q+k)j} \right) c_k c_q,$$

e então

$$\sum_{j=1}^{N} c_{j+1} c_j = -i \sum_{k \in K^{\pm}} e^{-ik} c_k c_{-k}.$$

Mais uma vez, tomando o adjunto dos dois lados da igualdade, temos que

$$\sum_{j=1}^{N} c_j^{\dagger} c_{j+1}^{\dagger} = i \sum_{k \in K^{\pm}} e^{ik} c_{-k}^{\dagger} c_k^{\dagger}.$$

Por fim,

$$\sum_{j=1}^{N} c_{j}^{\dagger} c_{j} = \sum_{k,q \in K^{\pm}} \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} e^{-i(q-k)j} \right) c_{k}^{\dagger} c_{q},$$

e então

$$\sum_{j=1}^{N} c_j^{\dagger} c_j = \sum_{k \in K^{\pm}} c_k^{\dagger} c_k.$$

Juntando todos os termos, temos que

$$\begin{split} H_{\pm} &= -J \sum_{k \in K^{\pm}} \left[(e^{ik} + e^{-ik}) c_k^{\dagger} c_k - i e^{-ik} c_k c_{-k} + i e^{ik} c_{-k}^{\dagger} c_k^{\dagger} \right] - 2g \sum_{k \in K^{\pm}} c_k^{\dagger} c_k \\ &= -J \sum_{k \in K^{\pm}} \left[(2 \text{cos} k) c_k^{\dagger} c_k - i e^{-ik} c_k c_{-k} + i e^{ik} c_{-k}^{\dagger} c_k^{\dagger} \right] - 2g \sum_{k \in K^{\pm}} c_k^{\dagger} c_k \\ &= -\sum_{k \in K^{\pm}} \left[2(g + J \text{cos} k) c_k^{\dagger} c_k - J i e^{-ik} c_k c_{-k} + J i e^{ik} c_{-k}^{\dagger} c_k^{\dagger} \right]. \end{split}$$

Podemos escrever H_{\pm} de forma mais simétrica ainda. Note que

$$\sum_{k \in K^{\pm}} 2(g + J\cos k)c_k^{\dagger}c_k = \sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k > 0}} 2(g + J\cos k)(c_k^{\dagger}c_k + c_{-k}^{\dagger}c_{-k}),$$

e que

$$-\sum_{k \in K^{\pm}} Jie^{-ik}c_k c_{-k} = -\sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k > 0}} Ji\left(e^{-ik}c_k c_{-k} + e^{ik}c_{-k}c_k\right).$$

Utilizando que $c_k c_{-k} = -c_{-k} c_k$, temos que

$$-\sum_{k \in K^{\pm}} Jie^{-ik} c_k c_{-k} = \sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k > 0}} Ji(e^{ik} - e^{-ik}) c_k c_{-k},$$

ou seja,

$$-\sum_{k \in K^{\pm}} Jie^{-ik} c_k c_{-k} = -\sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k > 0}} 2J \sin k c_k c_{-k}.$$

Do mesmo modo,

$$\sum_{k \in K^\pm} Jie^{ik}c_{-k}^\dagger c_k^\dagger = \sum_{\substack{k \in K^\pm \\ k > 0}} Ji(e^{ik}c_{-k}^\dagger c_k^\dagger + e^{-ik}c_k^\dagger c_{-k}^\dagger),$$

ou seja,

$$\sum_{k\in K^\pm} Jie^{ik}c_{-k}^\dagger c_k^\dagger = -\sum_{\substack{k\in K^\pm\\k>0}} 2J\mathrm{sin}kc_{-k}^\dagger c_k^\dagger.$$

Assim, temos finalmente a Hamiltoniana no espaço de Fourier:

$$H_{\pm} = -\sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k > 0}} \left[2(g + J\cos k)(c_k^{\dagger}c_k + c_{-k}^{\dagger}c_{-k}) + 2J\sin k(c_k^{\dagger}c_{-k}^{\dagger} + c_{-k}c_k) \right],$$
(1.4.32)

onde utilizamos que $\{c_{k}^{\dagger}, c_{-k}^{\dagger}\} = \{c_{k}, c_{-k}\} = 0.$

Para diagonalizar a (1.4.32), vamos aplicar uma transformação de Bogoljubov [7] nos operadores. Para todo $k \in K^{\pm}$, definimos um novo conjunto de operadores $\{\eta_k\}$ através das relações

$$c_k = \cos\frac{\theta_k}{2}\eta_k - \sin\frac{\theta_k}{2}\eta_{-k}^{\dagger}, \qquad (1.4.33)$$

$$c_{-k} = \cos\frac{\theta_k}{2}\eta_{-k} + \sin\frac{\theta_k}{2}\eta_k^{\dagger}, \qquad (1.4.34)$$

onde o ângulo θ_k ainda será escolhido de forma conveniente. Os operadores $\{\eta_k\}$ satisfazem a mesma álgebra que os $\{c_k\}$, como mostrado no apêndice B. Sob essa transformação, os termos da Hamiltoniana se tornam os seguintes:

$$\begin{split} c_k^\dagger c_k &= \left(\cos\frac{\theta_k}{2}\eta_k^\dagger - \sin\frac{\theta_k}{2}\eta_{-k}\right) \left(\cos\frac{\theta_k}{2}\eta_k - \sin\frac{\theta_k}{2}\eta_{-k}^\dagger\right) \\ &= \cos^2\frac{\theta_k}{2}\eta_k^\dagger \eta_k - \cos\frac{\theta_k}{2}\sin\frac{\theta_k}{2}\eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger - \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2}\eta_{-k}\eta_k + \sin^2\frac{\theta_k}{2}\eta_{-k}\eta_{-k}^\dagger\right) \\ &= \cos^2\frac{\theta_k}{2}\eta_k^\dagger \eta_k - \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2}\left(\eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger - \eta_k \eta_{-k}\right) + \sin^2\frac{\theta_k}{2}\left(1 - \eta_{-k}^\dagger \eta_{-k}\right), \end{split}$$

onde utilizamos as relações (B.1) e (B.2),

$$c_{-k}^{\dagger}c_{-k} = \cos^2\frac{\theta_k}{2}\eta_{-k}^{\dagger}\eta_{-k} - \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2}\left(\eta_k^{\dagger}\eta_{-k}^{\dagger} - \eta_k\eta_{-k}\right) + \sin^2\frac{\theta_k}{2}\left(1 - \eta_k^{\dagger}\eta_k\right),$$

obtida fazendo $k \to -k$ na equação para $c_k^{\dagger} c_k$, de acordo com a prescrição dada no apêndice B,

$$\begin{split} c_{-k}c_k &= \left(\cos\frac{\theta_k}{2}\eta_{-k} + \sin\frac{\theta_k}{2}\eta_k^\dagger\right) \left(\cos\frac{\theta_k}{2}\eta_k - \sin\frac{\theta_k}{2}\eta_{-k}^\dagger\right) \\ &= \cos^2\frac{\theta_k}{2}\eta_{-k}\eta_k - \cos\frac{\theta_k}{2}\sin\frac{\theta_k}{2}\eta_{-k}\eta_{-k}^\dagger + \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2}\eta_k^\dagger\eta_k - \sin^2\frac{\theta_k}{2}\eta_k^\dagger\eta_{-k}^\dagger \\ &= -\cos^2\frac{\theta_k}{2}\eta_k\eta_{-k} - \sin^2\frac{\theta_k}{2}\eta_k^\dagger\eta_{-k}^\dagger + \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2}\eta_k^\dagger\eta_k - \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2}\left(1 - \eta_{-k}^\dagger\eta_{-k}\right), \end{split}$$

e, finalmente,

$$c_k^\dagger c_{-k}^\dagger = \cos^2\!\frac{\theta_k}{2} \eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger + \sin^2\!\frac{\theta_k}{2} \eta_k \eta_{-k} + \sin\!\frac{\theta_k}{2} \cos\!\frac{\theta_k}{2} \eta_k^\dagger \eta_k - \sin\!\frac{\theta_k}{2} \cos\!\frac{\theta_k}{2} \left(1 - \eta_{-k}^\dagger \eta_{-k}\right),$$

esta última equação obtida tomando o adjunto de $c_{-k}c_k$. Segue que

$$c_k^{\dagger} c_k + c_{-k}^{\dagger} c_{-k} = 1 - \cos\theta_k + \cos\theta_k (\eta_k^{\dagger} \eta_k + \eta_{-k}^{\dagger} \eta_{-k}) - \sin\theta_k (\eta_k^{\dagger} \eta_{-k}^{\dagger} - \eta_k \eta_{-k}),$$

e que

$$c_k^{\dagger} c_{-k}^{\dagger} + c_{-k} c_k = -\sin\theta_k + \sin\theta_k (\eta_k^{\dagger} \eta_k + \eta_{-k}^{\dagger} \eta_{-k}) + \cos\theta_k (\eta_k^{\dagger} \eta_{-k}^{\dagger} - \eta_k \eta_{-k}).$$

Para simplificar a notação, vamos definir por um momento $\Omega = 2(g + J\cos k)$ e $\lambda = 2J\sin k$. Para cada $k \in K^{\pm}$, temos que

$$\Omega(c_k^{\dagger}c_k + c_{-k}^{\dagger}c_{-k}) + \lambda(c_k^{\dagger}c_{-k}^{\dagger} + c_{-k}c_k) = \Omega(1 - \cos\theta_k) - \lambda\sin\theta_k + (\Omega\cos\theta_k + \lambda\sin\theta_k)(\eta_k^{\dagger}\eta_k + \eta_{-k}^{\dagger}\eta_{-k}) + (-\Omega\sin\theta_k + \lambda\cos\theta_k)(\eta_k^{\dagger}\eta_{-k}^{\dagger} - \eta_k\eta_{-k}),$$

e então, para eliminar o termo não-diagonal, θ_k deve ser tal que

$$-\Omega \sin \theta_k + \lambda \cos \theta_k = 0,$$

isto é,

$$\tan \theta_k = \frac{\lambda}{\Omega} = \frac{J \sin k}{g + J \cos k}.$$
(1.4.35)

Escolhendo tal θ_k , temos que

$$\begin{split} \Omega(1-\cos\theta_k) - \lambda \sin\theta_k &= \Omega - \frac{1}{\sqrt{\Omega^2 + \lambda^2}} \left(\Omega^2 + \lambda^2\right) = \Omega - \sqrt{\Omega^2 + \lambda^2} \\ &= 2(g + J \cos k) - \sqrt{g^2 + J^2 + 2gJ \cos k}, \end{split}$$

e que

$$\Omega\cos\theta_k + \lambda\sin\theta_k = \sqrt{\Omega^2 + \lambda^2} = \sqrt{g^2 + J^2 + 2gJ\cos k}.$$
 (1.4.36)

Definindo

$$\epsilon_k = \sqrt{g^2 + J^2 + 2gJ\cos k},\tag{1.4.37}$$

obtemos a Hamiltoniana

$$H_{\pm} = -\sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k > 0}} \left[2(g + J \cos k) - \epsilon_k \right] - \sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k > 0}} \epsilon_k (\eta_k^{\dagger} \eta_k + \eta_{-k}^{\dagger} \eta_{-k})$$
$$= E_0 - \sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k > 0}} \epsilon_k (\eta_k^{\dagger} \eta_k + \eta_{-k}^{\dagger} \eta_{-k}),$$

onde

$$E_0 = -\sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k > 0}} \left[2(g + J\cos k) - \epsilon_k \right]. \tag{1.4.38}$$

Expressando H_{\pm} de forma mais simétrica, temos que

$$\sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k > 0}} \epsilon_k (\eta_k^{\dagger} \eta_k + \eta_{-k}^{\dagger} \eta_{-k}) = \sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k > 0}} \epsilon_k \eta_k^{\dagger} \eta_k + \sum_{\substack{k \in K^{\pm} \\ k < 0}} \epsilon_{-k} \eta_k^{\dagger} \eta_k,$$

e, como $\epsilon_{-k} = \epsilon_k$, temos finalmente a Hamiltoniana diagonalizada

$$H_{\pm} = E_0 - 2\sum_{k \in K^{\pm}} \epsilon_k \eta_k^{\dagger} \eta_k. \tag{1.4.39}$$

Na figura 8, mostramos um gráfico da energia ϵ_k em função de k para certos valores dos parâmetros J e g. Cada operador η_k^{\dagger} cria um férmion no modo k com energia ϵ_k . O estado fundamental é caracterizado pela ausência de férmions. Então, o primeiro estado excitado contém um férmion em um modo k tal que sua energia é a menor possível, isto é, k é um ponto de mínimo de ϵ_k . Os pontos de extremo da (1.4.37) são dados pela condição

$$\frac{\partial}{\partial k} \epsilon_k = \frac{1}{2\epsilon_k} (-2gJ \sin k) = 0, \qquad (1.4.40)$$

ou seja, os pontos de extremo são

$$k = 0, \pm \pi, \pm 2\pi, \dots$$
 (1.4.41)

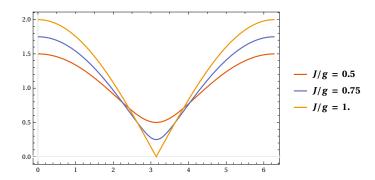


Figura 8: A energia ϵ_k em função de k para alguns valores de J/g. Note que, para J/g = 1, a energia mínima é igual a zero.

Temos que, em $k = \pm 2n\pi$, n = 0, 1, 2, ...

$$\epsilon_{\pm 2n\pi} = \sqrt{g^2 + J^2 + 2gJ} = \sqrt{(J+g)^2} = |J+g|,$$

enquanto que em $k = \pm (2n+1)\pi$,

$$\epsilon_{\pm(2n+1)\pi} = \sqrt{g^2 + J^2 - 2gJ} = \sqrt{(J-g)^2} = |J-g|.$$

Como escolhemos g < 0, temos na verdade que

$$\epsilon_{\pm 2n\pi} = |J - |g||,$$

enquanto que

$$\epsilon_{\pm (2n+1)\pi} = |J + |g||.$$

Logo, os mínimos de ϵ_k ocorrem nos pontos

$$k = 0, \pm 2\pi, ...$$

e são esses modos que a primeira excitação fermiônica pode habitar.

A diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, também chamada de energy gap (ou mass gap), é dada por

$$\Delta = |J - |g||. \tag{1.4.42}$$

Note que no ponto crítico J=|g|, o gap fecha, isto é, $\Delta=0$ e não há mais barreiras de energia impedindo estados fundamentais de se tornarem excitados e vice-versa, o que permite a mudança de configuração do sistema. O fechamento do gap é mais uma característica de uma transição de fase.

Agora, voltando à (1.4.29), vamos tomar o limite termodinâmico, isto é, vamos considerar uma cadeia muito longa $(N \to \infty)$. No entanto, se fizermos

isso de forma ingênua, a força da interação por sítio, representada pela razão J/N, tenderia a zero, o que significa que efetivamente teríamos uma teoria de férmions não-interagentes, diferente do modelo de Ising original. Para evitar isso, manteremos sempre a razão J/N constante, o que implica também tomar a constante de acoplamento J muito grande $(J \to \infty)$. Definimos então as variáveis $x_i = i/N$, para i = 1, ..., N, de modo que o espaçamento da rede $\Delta x = x_{i+1} - x_i = 1/N$ seja infinitesimal $(\Delta x \to 0)$ no limite termodinâmico. Podemos agora definir os campos fermiônicos

$$\psi(x_i) = \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} c_i, \tag{1.4.43}$$

para todo i=1,...,N. No setor de paridade positiva, a condição de fronteira é $\psi(x_{N+1})=-\psi(x_1)$, enquanto que, no setor de paridade negativa, $\psi(x_{N+1})=\psi(x_1)$. Note que

$$\{c_i, c_i^{\dagger}\} = \delta_{ij} \Leftrightarrow \{\psi(x_i), \psi^{\dagger}(x_j)\} = N\delta_{ij},$$

isto é, $\{\psi(x_i), \psi^{\dagger}(x_j)\} = N$ se $x_i = x_j$ e $\{\psi(x_i), \psi^{\dagger}(x_j)\} = 0$ se $x_i \neq x_j$. Então, para $N \to \infty$, o lado direito da equação acima se aproxima de uma função delta de Dirac, e podemos escrever

$$\{\psi(x), \psi^{\dagger}(x')\} = \delta(x - x').$$
 (1.4.44)

no limite termodinâmico.

Com isso em mente, temos que, para qualquer ponto i fixo na rede,

$$-J\left[c_{i}^{\dagger}c_{i+1}+c_{i+1}^{\dagger}c_{i}+c_{i}^{\dagger}c_{i+1}^{\dagger}+c_{i+1}c_{i}\right]-2gc_{i}^{\dagger}c_{i}$$

$$=-J\Delta x\left[\psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i+1})+\psi^{\dagger}(x_{i+1})\psi(x_{i})+\psi^{\dagger}(x_{i})\psi^{\dagger}(x_{i+1})\right]$$

$$+\psi(x_{i+1})\psi(x_{i})-2g\Delta x\psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i})$$

$$=-J\Delta x\left[\psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i}+\Delta x)+\psi^{\dagger}(x_{i}+\Delta x)\psi(x_{i})+\psi^{\dagger}(x_{i})\psi^{\dagger}(x_{i}+\Delta x)\right]$$

$$+\psi(x_{i}+\Delta x)\psi(x_{i})-2g\Delta x\psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i}).$$

Como

$$\psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i} + \Delta x) = \psi^{\dagger}(x_{i}) \left[\psi(x_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \psi(x_{i}) \Delta x + O(\Delta x^{2}) \right], \quad (1.4.45)$$

$$\psi^{\dagger}(x_{i} + \Delta x)\psi(x_{i}) = \left[\psi^{\dagger}(x_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \psi^{\dagger}(x_{i}) \Delta x + O(\Delta x^{2}) \right] \psi(x_{i}), \quad (1.4.46)$$

$$\psi^{\dagger}(x_{i})\psi^{\dagger}(x_{i} + \Delta x) = \psi^{\dagger}(x_{i}) \left[\psi^{\dagger}(x_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \psi^{\dagger}(x_{i}) \Delta x + O(\Delta x^{2}) \right]$$

$$= \psi^{\dagger}(x_{i}) \frac{\partial}{\partial x_{i}} \psi^{\dagger}(x_{i}) \Delta x + O(\Delta x^{2}) \quad (1.4.47)$$

$$\psi(x_{i} + \Delta x)\psi(x_{i}) = \left[\psi(x_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \psi(x_{i}) \Delta x + O(\Delta x^{2}) \right] \psi(x_{i})$$

$$= \frac{\partial}{\partial x_{i}} \psi(x_{i})\psi(x_{i}) \Delta x + O(\Delta x^{2}), \quad (1.4.48)$$

pois

$$(\psi(x))^2 = (\psi^{\dagger}(x))^2 = 0,$$

obtemos

$$-J\Delta x \left[\psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i}) + \psi^{\dagger}(x_{i})\frac{\partial}{\partial x_{i}}\psi(x_{i})\Delta x + \psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i})\Delta x \right]$$

$$-J\Delta x \left[\psi^{\dagger}(x_{i})\frac{\partial}{\partial x_{i}}\psi^{\dagger}(x_{i})\Delta x + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\psi(x_{i})\psi(x_{i})\Delta x \right] - 2g\Delta x\psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i}) + O(\Delta x^{3})$$

$$= -2\Delta x(J+g)\psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i}) - J\Delta x\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i}) \right]$$

$$-J\Delta x \left[\psi^{\dagger}(x_{i})\frac{\partial}{\partial x_{i}}\psi^{\dagger}(x_{i})\Delta x + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\psi(x_{i})\psi(x_{i})\Delta x \right] + O(\Delta x^{3})$$

$$= -J\Delta x \left[\psi^{\dagger}(x_{i})\frac{\partial}{\partial x_{i}}\psi^{\dagger}(x_{i})\Delta x + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\psi(x_{i})\psi(x_{i})\Delta x \right] - 2\Delta \psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i})\Delta x$$

$$- J\Delta x \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\psi^{\dagger}(x_{i})\psi(x_{i}) \right] + O(\Delta x^{3}),$$

onde utilizamos que, como g < 0 e considerando J > 0, $(J + g) = |J - |g|| = \Delta$. No ponto crítico da transição de fase, o gap se fecha $(\Delta = 0)$ e temos que

$$H_{\pm} = \sum_{i=1}^{N} \left[-\frac{J}{N} \left(\psi^{\dagger}(x_i) \frac{\partial}{\partial x_i} \psi^{\dagger}(x_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(x_i) \psi(x_i) \right) \right] \Delta x$$
$$-J \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\psi^{\dagger}(x_i) \psi(x_i) \right] \Delta x + O(\Delta x^3).$$

No limite $N \to \infty$,

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\psi^{\dagger}(x_i) \psi(x_i) \right] \Delta x \to \int \frac{\partial}{\partial x} \left[\psi^{\dagger}(x) \psi(x) \right] dx = 0,$$

devido à condição de fronteira (anti-)periódica. Finalmente, temos então que a Hamiltoniana do modelo de Ising transverso no ponto crítico é, no limite termodinâmico $N \to \infty$, dada por

$$H_{\pm} = -\frac{\nu}{2} \lim_{N \to \infty} \sum_{i=1}^{N} \left(\psi^{\dagger}(x_i) \frac{\partial}{\partial x_i} \psi^{\dagger}(x_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(x_i) \psi(x_i) \right) \Delta x$$
$$\to -\frac{\nu}{2} \int \left(\psi^{\dagger}(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi^{\dagger}(x) - \psi(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right) dx, \qquad (1.4.49)$$

onde $\nu = 2J/N$ é uma constante e utilizamos que $\partial_x(\psi\psi) = 0$.

A partir daqui, podemos expressar a teoria por integrais de caminhos, seguindo os passos mostrados no apêndice C. Da (C.64), temos que a ação dessa teoria é dada por

$$S[\psi^{\dagger}, \psi] = \int dt dx \left[-i\psi^{\dagger} \partial_t \psi + \frac{1}{2} \left(\psi^{\dagger} \partial_x \psi^{\dagger} - \psi \partial_x \psi \right) \right],$$

onde consideramos $\nu = 1$ (medimos energia em unidades de ν) e os campos ψ e ψ^{\dagger} agora representam os auto-valores dos auto-estados coerentes dos operadores fermiônicos ψ , ψ^{\dagger} . Note que, promovendo a condição de fronteira (anti-)periódica para o espaço-tempo, temos que

$$0 = \int dt \partial_t (\psi^{\dagger} \psi) = \int dt \left(\partial_t \psi^{\dagger} \psi + \psi^{\dagger} \partial_t \psi \right),$$

e segue que

$$\int dt \psi^{\dagger} \partial_t \psi = - \int dt \partial_t \psi^{\dagger} \psi.$$

Ou seja, dentro de um sinal de integral, temos que

$$\psi^{\dagger} \partial_t \psi = -\partial_t \psi^{\dagger} \psi,$$

e então podemos escrever

$$\psi^{\dagger} \partial_t \psi = \frac{1}{2} (\psi^{\dagger} \partial_t \psi - \partial_t \psi^{\dagger} \psi) = \frac{1}{2} (\psi^{\dagger} \partial_t \psi + \psi \partial_t \psi^{\dagger}),$$

onde anti-comutamos as variáveis de Grassmann. O integrando da ação é, então,

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[-i(\psi^{\dagger} \partial_t \psi + \psi \partial_t \psi^{\dagger}) + (\psi^{\dagger} \partial_x \psi^{\dagger} - \psi \partial_x \psi) \right]. \tag{1.4.50}$$

Definindo o spinor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^{\dagger} \end{pmatrix}, \tag{1.4.51}$$

queremos escrever \mathcal{L} como uma forma quadrática, i.e.,

$$\mathcal{L} = \Psi^{\dagger} \gamma^0 \begin{pmatrix} u_1 & u_2 \\ u_3 & u_4 \end{pmatrix} \Psi, \tag{1.4.52}$$

onde

$$\gamma^0 = \left(\begin{array}{cc} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{array}\right) \tag{1.4.53}$$

é uma matriz e os elementos u_i , i=1,...,4, são determinados da seguinte forma: temos que

$$\mathcal{L} = (\psi^{\dagger} \ \psi) \begin{pmatrix} u_3 & u_4 \\ u_1 & u_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^{\dagger} \end{pmatrix} = (\psi^{\dagger} \ \psi) \begin{pmatrix} u_3 \psi + u_4 \psi^{\dagger} \\ u_1 \psi + u_2 \psi^{\dagger} \end{pmatrix}$$
$$= \psi^{\dagger} (u_3 \psi + u_4 \psi^{\dagger}) + \psi (u_1 \psi + u_2 \psi^{\dagger}),$$

e, comparando com a (1.4.50), segue que

$$u_1 = -\partial_x, \tag{1.4.54}$$

$$u_2 = -i\partial_t, \tag{1.4.55}$$

$$u_3 = -i\partial_t, \tag{1.4.56}$$

$$u_4 = \partial_x, \tag{1.4.57}$$

o que implica que

$$\begin{pmatrix} u_1 & u_2 \\ u_3 & u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial_x & -i\partial_t \\ -i\partial_t & \partial_x \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \partial_t - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \partial_x,$$
(1.4.58)

ou seja,

$$\begin{pmatrix} u_1 & u_2 \\ u_3 & u_4 \end{pmatrix} = -i \left[\gamma^0 \partial_t - \gamma^1 \partial_x \right], \qquad (1.4.59)$$

onde

$$\gamma^1 = i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{1.4.60}$$

As matrizes γ^0 , γ^1 são as chamadas matrizes gamma (ou matrizes de Dirac) na representação de Majorana, que geram a 'algebra de Clifford definida pela relação

$$\{\gamma^{\alpha}, \gamma^{\beta}\} = 2h^{\alpha\beta},$$

onde $h_{\alpha\beta} = h^{\alpha\beta} = \text{diag}(+1, -1)$ é a métrica do espaço de Minkowski em (1+1)d. Note que a noção de espaço-tempo surge naturalmente nessa formulação da teoria. Assim, podemos escrever finalmente que

$$\mathcal{L} = -\frac{i}{2} \Psi^{\dagger} \gamma^0 \gamma^{\mu} \partial_{\mu} \Psi, \qquad (1.4.61)$$

onde

$$\gamma^{\mu}\partial_{\mu} = h^{\mu\nu}\gamma^{\mu}\partial_{\nu} = \gamma^{0}\partial_{t} - \gamma^{1}\partial_{x}, \qquad (1.4.62)$$

e a ação do modelo de Ising transverso, no limite termodinâmico e no ponto crítico da transição de fase, é dada por

$$S[\psi^{\dagger}, \psi] = \frac{1}{2} \int dt dx \sqrt{-h} (-i) \bar{\Psi} \gamma^{\mu} \partial_{\mu} \Psi, \qquad (1.4.63)$$

onde definimos $\bar{\Psi} = \Psi^{\dagger} \gamma^0$ e introduzimos a raiz quadrada do determinante da métrica $\sqrt{-h} = 1$ para tornar explicita a invariância de Lorentz da ação. A teoria quântica é, então, completamente determinada pelo funcional gerador (C.67):

$$Z = \int D[\psi]D[\psi^{\dagger}] \exp\left\{iS\left[\psi^{\dagger}, \psi\right]\right\}. \tag{1.4.64}$$

No limite do contínuo, o modelo de Ising transverso no ponto crítico é dado pela ação do férmion livre (1.4.63). Sabe-se que essa ação descreve um exemplo simples de uma teoria conforme de campos [8, 9]. A invariância conforme emerge, neste exemplo, como consequência da invariância por translações, rotações e escalas. De fato, no ponto crítico da transição de fase do modelo de Ising, o sistema parece o mesmo não importando se o olhamos de perto ou de longe, pois os spins estão se ordenando/desordenando em todas as escalas de distância.

Vamos utilizar a entropia de emaranhamento (ver apêndice D) para verificar se de fato existem correlações quânticas no modelo de Ising transverso no ponto crítico e no limite termodinâmico. A entropia de emaranhamento, ou pelo menos seu comportamento por escala, é conhecida para qualquer teoria conforme de campos em 1+1 dimensões [10, 11, 12]. Separando o sistema em duas regiões, A e B, onde a região A possui comprimento l, a entropia de emaranhamento S_A , para uma teoria conforme de campos em 1+1 dimensões com carga central c, é dada por

$$S_A = \frac{c}{3}\log\left(\frac{l}{a}\right) + \text{ constante},$$
 (1.4.65)

onde a é um parâmetro de corte de curtas distâncias. Isto é, em um sistema definido numa rede, a é o espaçamento da rede. O termo constante é não-universal, isto é, não é característico do ponto crítico do sistema. Assim, no caso da teoria conforme (1.4.63), c=1/2, e segue que a entropia de emaranhamento do modelo de Ising transverso, no ponto crítico, é dada por

$$S_A = \frac{1}{6} \log \left(\frac{l}{a} \right) + \text{ constante.}$$
 (1.4.66)

Portanto, no ponto crítico, o modelo de Ising transverso de fato apresenta uma entropia de emaranhamento não nula, que cresce com o comprimento do sub-sistema A. Podemos interpretar este resultado da seguinte forma: no ponto crítico, como o sistema é invariante por transformações de escala, todos os spins em cada escala de comprimento l estão emaranhados, fazendo com que a entropia cresça com o volume. Como a entropia é uma função monótona, o emaranhamento deve atingir seu máximo no ponto crítico, decrescendo até chegar a zero para J >> g ou J << g.

Resumindo, através do modelo de Ising, vimos que uma fase da matéria é caracterizada por uma organização específica de seus componentes. Por exemplo, na fase paramagnética do modelo de Ising, os spins apontam em direções aleatórias, enquanto que em sua fase ferromagnética, todos os spins apontam em uma mesma direção. A distinção entre essas duas fases pode ser feita medindo-se o parâmetro de ordem do sistema, que neste caso é a magnetização por spin. Esta, por sua vez é igual a zero na fase paramagnética e diferente de zero na fase ferromagnética. O estado paramagnético possui simetria por rotações dos spins, diferentemente do ferromagnético que não é simétrico. Na passagem de uma fase para outra, então, acontece uma quebra espontânea de simetria no sistema. Toda essa fenomenologia, conhecida como teoria de Landau das transições de fase, pode ser deduzida a partir da expansão da energia livre em potências do parâmetro de ordem próximo ao ponto crítico.

Vamos ressaltar dois pontos importantes que apareceram no estudo do modelo de Ising, mas antes sempre vamos nos recordar que, à temperatura zero, as fases do sistema são definidas pelos seus estados fundamentais. Por isso, vamos nos referir com frequência a fases da matéria como sendo estados quânticos. Em primeiro lugar, podemos diferenciar entre os estados ferromagnético e paramagnético medindo a orientação dos spins em uma pequena vizinhança. Em outras palavras, medidas locais podem ser feitas para determinar em que estado o sistema se encontra. Em segundo lugar, fases distintas apresentam simetrias distintas. O estado paramagnético é simétrico sob a mudança de direção de um único spin, enquanto que o estado ferromagnético não o é. Essas duas características, que apareceram no modelo de Ising, são comuns a muitos sistemas de matéria condensada e são essenciais para suas descrições através da teoria de Landau. No entanto, elas não estão presentes em sistemas com ordem topológica, como veremos na próxima seção. Nestes, operadores locais não conseguem distinguir entre fases diferentes. Mais ainda, estados distintos podem possuir as mesmas simetrias. Essas propriedades tão diferentes das usuais impedem que a teoria de Landau seja utilizada para explicar as fases de sistemas com ordem topológica.

2 O Efeito Hall Quântico Fracionário

Por muito tempo, a teoria de Landau foi suficiente para explicar todas as transições de fase conhecidas. No entanto, em 1982, Daniel Tsui et al. [1] descobriram experimentalmente, em uma versão quântica do efeito Hall, estados fundamentais de um sistema em baixas temperaturas, isto é, fases da matéria, que não podiam ser explicados pela teoria de Landau. Neste fenômeno, conhecido como o efeito Hall quântico fracionário (FQHE, da sigla em inglês), diferentes estados possuem as mesmas simetrias e nenhuma medida local é capaz de distingui-los. Nesta seção, estudaremos o FQHE, mostrando suas divergências com a teoria de Landau e todas as suas propriedades que sugerem uma origem topológica para este novo tipo de fase da matéria.

2.1 O Efeito Hall Clássico

Vamos começar revisando o efeito Hall clássico, cuja configuração é a seguinte: posicionamos uma amostra de algum material no plano (x,y) e aplicamos uma diferença de potencial ao longo da direção x. Isto gera uma corrente nesse eixo. Ao mesmo tempo, aplicamos um campo magnético constante na direção z, perpendicular ao plano (x,y). O que se observa é o surgimento de uma diferença de potencial ao longo da direção y, chamada voltagem de Hall. Vamos utilizar a teoria eletromagnética clássica para deduzir esse resultado.

O efeito Hall se deve, basicamente, ao fato de que partículas carregadas se movem em círculos na presença de campos magnéticos. Por exemplo, considere um elétron de carga -e e massa m se movendo no plano (x,y). Aplicando um campo magnético constante $\mathbf{B}=B\hat{z}$ na direção \hat{z} , o movimento do elétron é regido pelas equações

$$m\ddot{x} = -e\dot{y}B,\tag{2.1.1}$$

$$m\ddot{y} = e\dot{x}B. \tag{2.1.2}$$

Seja $(v_x, v_y) = (\dot{x}, \dot{y})$. Temos que

$$\frac{dv_x}{dt} = -\frac{eB}{m}v_y \Leftrightarrow \frac{d^2v_x}{dt^2} = -\frac{eB}{m}\frac{dv_y}{dt} = -\left(\frac{eB}{m}\right)^2v_x.$$

Definindo

$$\omega_B = \frac{eB}{m},\tag{2.1.3}$$

temos a equação

$$\frac{d^2v_x}{dt^2} = -\omega_B^2 v_x,$$

cuja solução é

$$v_x = \text{Re}Ae^{i\omega_B t + \phi} = A\cos(\omega_B t + \phi),$$

onde A e ϕ são constantes de integração. Daí, como $v_x = \dot{x}$,

$$\int_{t_0}^t v_x(t')dt' = x(t) - x(t_0)$$

$$= \int_{t_0}^t A\cos(\omega_B t + \phi)dt' = \frac{A}{\omega_B}(\sin(\omega_B t + \phi) - \sin(\omega_B t_0 + \phi)).$$

Definindo $x_0 = x(t_0) - \sin(\omega_B t_0 + \phi)$ e $R_{\omega_B} = A/\omega_B$, temos como resultado

$$x(t) = x_0 + R_{\omega_B} \sin(\omega_B t + \phi).$$

Do mesmo modo, pode-se obter que

$$y(t) = y_0 - R_{\omega_B} \cos(\omega_B t + \phi).$$

Ou seja, o elétron se move em círculos de raio R_{ω_B} centrados em (x_0, y_0) , com uma frequência ω_B , chamada frequência de cíclotron.

Considere então que temos vários elétrons no plano (x, y) sofrendo ação de um campo elétrico constante $\mathbf{E} = E\hat{x}$ na direção \hat{x} . Os elétrons se movem

na direção do campo elétrico, gerando uma corrente ao longo do eixo \hat{x} . Se introduzirmos um campo magnético $\mathbf{B}=B\hat{z}$, os elétrons serão desviados ao longo do eixo \hat{y} pelo movimento circular, em direção a um dos extremos do plano. Alguns elétrons se acumularão neste extremo, fazendo surgir uma concentração de cargas ali, o que gera um campo elétrico ao longo do eixo \hat{y} . As cargas se acumulam ali até que o campo elétrico seja intenso o suficiente para repelir outros elétrons que chegam movidos pelo campo magnético, o que gera uma situação de equilíbrio onde existe corrente apenas ao longo do eixo \hat{x} , mas também existe um campo elétrico na direção \hat{y} , que gera a voltagem de Hall V_H .

O movimento de um elétron nas condições descritas acima pode ser descrito por um *modelo de Drude*:

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{m}{\tau}\mathbf{v},$$
 (2.1.4)

onde $\mathbf{v} = (v_x, v_y, 0)$, $\mathbf{E} = (E_x, 0, 0)$ e $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. O termo $\frac{m}{\tau}\mathbf{v}$ descreve uma fricção, isto é, modela a dissipação de energia causada por colisões do elétron com impurezas ou outros elétrons. O parâmetro τ pode ser visto como um tempo médio entre tais colisões. A configuração de equilíbrio ocorre quando todas as forças estão balanceadas e não há aceleração do elétron, isto é,

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = 0.$$

A velocidade de equilíbrio satisfaz, então, a equação vetorial

$$e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \frac{m}{\tau} \mathbf{v} = 0.$$

Em componentes,

$$\frac{m}{\tau}v_x + eBv_y = -eE_x,\tag{2.1.5}$$

$$-eBv_x + \frac{m}{\tau}v_y = 0. (2.1.6)$$

Suponha que temos, ao invés de apenas um, uma densidade de n elétrons por unidade de volume. A velocidade de equilíbrio destes elétrons está relacionada a uma densidade de corrente elétrica de equilíbrio

$$\mathbf{J} = -ne\mathbf{v}$$
.

Então, a equação para a densidade de corrente de equilíbrio é, em componentes, dada por

$$J_x + \tau \omega_B J_y = \frac{e^2 n \tau}{m} E_x, \qquad (2.1.7)$$

$$\tau \omega_B J_x - J_y = 0. \tag{2.1.8}$$

Em forma matricial,

$$\begin{pmatrix} 1 & \tau \omega_B \\ \tau \omega_B & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \frac{ne^2 \tau}{m} \begin{pmatrix} E_x \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{2.1.9}$$

Resolvendo para $\mathbf{J} = (J_x, J_y)$, obtemos

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + (\tau \omega_B)^2} \frac{ne^2 \tau}{m} \begin{pmatrix} 1 & -\tau \omega_B \\ \tau \omega_B & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{2.1.10}$$

Comparando com a lei de Ohm

$$J = \sigma E$$
.

onde σ é a condutividade, temos aqui uma condutividade dada por uma matriz, isto é,

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + (\tau \omega_B)^2} \frac{ne^2 \tau}{m} \begin{pmatrix} 1 & -\tau \omega_B \\ \tau \omega_B & 1 \end{pmatrix}, \qquad (2.1.11)$$

onde σ_{xx} é a condutividade na direção \hat{x} , $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$ é a condutividade na direção diagonal e σ_{yy} é a condutividade na direção \hat{y} . Ou seja, no equilíbrio, temos condutividade não-nula em todas as direções. Mais ainda, a corrente de equilíbrio possui uma componente não-nula na direção \hat{y} , implicando um campo elétrico efetivo nessa direção, proporcional ao campo elétrico E_x , ao campo magnético B e à densidade de carga n, como esperado. Definindo

$$\sigma_{DC} = \frac{ne^2\tau}{m}$$

como a condutividade (DC) na ausência de campos magnéticos, escrevemos

$$\sigma = \frac{\sigma_{DC}}{1 + (\tau \omega_B)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\tau \omega_B \\ \tau \omega_B & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.1.12}$$

A condutividade não-nula nas outras direções além da direção \hat{x} é a causa do efeito Hall. No entanto, estamos mais acostumados a medir a resistência elétrica de materiais. A resistência elétrica é proporcional à resistividade $\rho = \sigma^{-1}$, onde a constante de proporcionalidade depende da geometria do meio onde os elétrons se propagam. Aqui, a resistividade é dada por

$$\rho = \frac{1}{\sigma_{DC}} \begin{pmatrix} 1 & \tau \omega_B \\ -\tau \omega_B & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.1.13}$$

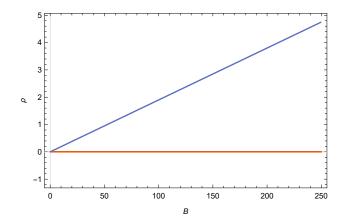


Figura 9: Resistividade ρ em função do campo magnético B como prevista pela teoria do efeito Hall clássico. A resistividade na direção \hat{x} , ρ_{xx} , (em laranja) é constante, enquanto que a resistividade na direção diagonal ρ_{xy} (em azul) cresce linearmente com o campo magnético.

Ou seja, a resistividade na direção \hat{x} é

$$\rho_{xx} = \frac{m}{ne^2\tau},\tag{2.1.14}$$

enquanto que a resistividade na direção transversal é

$$\rho_{xy} = \frac{B}{ne}. (2.1.15)$$

Note que $\rho_{xy} = 0$ quando B = 0, como esperado.

Assim, suponha que temos um material onde os elétrons estão confinados a moverem-se em um plano bidimensional. A densidade de elétrons desse material é $n=1.1\times 10^{11}{\rm cm^{-2}}$, e sua mobilidade elétrica é $\mu=80000{\rm cm^2/V}$ sec. A mobilidade elétrica está relacionada com o tempo médio de espalhamento τ do seguinte modo: $\tau=(m/e)\mu$, onde m é a massa do elétron. Com $m=9.11\times 10^{-28}{\rm g}$ e $e=4.80\times 10^{-10}$ esu, $\tau=1.52\times 10^{-13}$ sec. Ou seja, $\rho_{xx}=2.36\times 10^{-7}~\Omega{\rm cm}$, e $\rho_{xy}=1.9\times 10^{-2}B~\Omega{\rm cm}$. O gráfico da resistividade em função do campo magnético para tal material seria dado pela figura 9. A resistência na direção \hat{x} é constante e bem pequena, enquanto que na direção diagonal ela cresce com o campo magnético. Com o campo mais intenso, mais rapidamente a configuração de equilíbrio é atingida e mais dificilmente os elétrons se moverão para a direção \hat{y} , como esperado.

2.2 O Efeito Hall Quântico: Experimentos

O efeito Hall clássico é observado à temperaturas cotidianas, como por exemplo a temperatura ambiente, de aproximadamente 300 K. À temperaturas

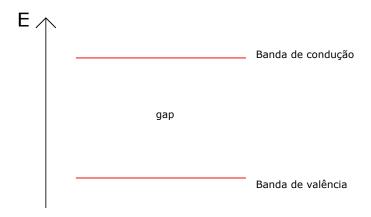


Figura 10: Diagrama de bandas de um semicondutor qualquer.

suficientemente baixas, esperamos que efeitos quânticos mudem o comportamento dos elétrons, alterando de alguma forma o efeito Hall. De fato, obervamos que, no regime quântico, o efeito Hall clássico pode dar lugar a dois efeitos quânticos distintos: o efeito Hall quântico inteiro (IQHE) [13] e o efeito Hall quântico fracionário (FQHE) [1]. Estes dois fenômenos foram descobertos experimentalmente nos anos de 1980, e revolucionaram a maneiram como entendemos fases da matéria. Aqui, vamos descrever em detalhes os experimentos que levaram a estas descobertas. Porém, para entender os experimentos, devemos conhecer o básico da física de semicondutores, então vamos começar por esta.

Um semicondutor é um material que é tanto um mal isolante quanto um metal ruim. Isto quer dizer que um semicondutor não conduz eletricidade tão bem quanto um metal, mas também não é um bom isolante pois pode conduzir alguma corrente. Fisicamente, um isolante pode ser caracterizado por possuir um enorme qap de energia entre a banda de valência (onde estão os estados ligados de maior energia) e a banda de condução (onde estariam os elétrons livres), sendo assim muito difícil um elétron ir para a banda de condução apenas sob ação de flutuações térmicas à temperaturas usuais. Em contraste, um metal não apresenta um gap de energia entre a banda de valência e a banda de condução. Pequenas flutuações térmicas podem fazer com que seus elétrons vão para a banda de condução, se tornando efetivamente livres. Em um semicondutor, temos uma espécie de situação intermediária. Como podemos ver na figura 10, o qap de energia entre a banda de condução e a banda de valência existe, mas não é tão grande. Assim, algumas flutuações térmicas suficientemente grandes podem fazer com que elétrons saiam da banda de valência e vão para a banda de condução.

Um exemplo de semicondutor bastante utilizado em aplicações tecnológi-

cas é o silício Si. O silício é um material tetravalente que forma cristais com formato de diamante. O gap de energia entre a banda de condução e a banda de valência no silício é de 1.17 eV. A energia térmica à temperatura ambiente é $k_bT\approx 26$ meV. Assim, à temperaturas usuais, o silício se comporta praticamente como um isolante.

Quando um elétron, costumeiramente denotado por n, sai da banda de valência e entra na banda de condução, ele deixa para trás um chamado buraco, que é efetivamente uma partícula de carga positiva de massa efetiva igual a menos a massa efetiva do elétron na camada de valência. O buraco, denotado por p, também é efetivamente livre, e pode se mover pela rede cristalina (um elétron de valência de outro átomo pode preencher o buraco, gerando um novo buraco no átomo que o abrigava). A quantidade de transportadores transporta

Semicondutores são interessantes porque permitem o controle do número total de portadores de carga no material. Podemos aumentar o número de portadores de carga em um semicondutor através de um processo chamado dopagem. Vamos descrever este processo para o silício Si. Podemos dopar uma amostra de Si com um átomo de fósforo P. Por dopar, queremos dizer que inserimos um átomo de fósforo na rede cristalina do silício. O fósforo é um elemento pentavalente, e então quando ele forma ligações covalentes com os átomos de Si, um elétron fica sem par e deve ir para a banda de condução, isto é, se torna livre para se mover na rede. No entanto, o fósforo sem um elétron se torna positivamente carregado, atraindo esse elétron livre. Podese mostrar que a energia desse estado ligado é bastante pequena, facilmente superada por flutuações térmicas. Assim, à temperatura ambiente, o fósforo está praticamente ionizado e existe mais um elétron livre no material. O número de portadores de carga aumente sem alterar a carga total da amostra. Este processo é conhecido como dopagem por doadores, que forma um semicondutor de tipo n.

Também podemos dopar o silício por receptadores, formando um semicondutor de tipo p. Para isso, dopamos a amostra de Si com átomos de boro B. O boro é um elemento trivalente, e por isso, quando ele faz ligações covalentes com os átomos de Si, falta um elétron para ele compartilhar, criando assim um buraco onde deveria estar essa ligação. Outros elétrons podem vir preencher este buraco, então o buraco é livre para se mover na rede. Quando o elétron preenche o buraco, o átomo de B fica negativamente carregado. Efetivamente então, existe um estado ligado entre o boro negativamente carregado e o buraco. Pode-se mostrar, porém, que esta energia de ligação é facilmente superável pela energia térmica, o que implica que de fato teremos um buraco livre na rede e um boro negativamente carregado à temperatura ambiente. Ou seja, aqui também aumentamos o número de portadores de carga sem alterar a carga total da amostra de Si.

Uma quantidade útil para caracterizer um semicondutor é a energia de Fermi E_F , definida como a energia do maior nível preenchido. Em semicondutores do tipo n, a introdução de doadores eleva a energia de Fermi para perto do início da banda de condução, enquanto que em semicondutores do tipo p, a introdução de receptores deixa a energia de Fermi um pouco acima do final da banda de valência.

O efeito Hall é observado em sistemas onde os elétrons podem se mover apenas em um plano bidimensional. Podemos usar semicondutores para contruir um aparelho conhecido como MOSFET, no qual os elétrons, efetivamente, se movem apenas em duas dimensões. MOSFET é uma sigla para Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor, e é um transistor construído pegando um semicondutor e colocando um isolante sobre ele. Sobre o isolante, colocamos um metal, muitas vezes também chamado de gate. Um esquema dessa construção é mostrado na figura 11. Vamos considerar então um MOSFET feito à base de silício Si, o chamado Si MOSFET. Pegamos uma amostra (suficientemente grande) de silício tipo p e colocamos sobre ela uma amostra (menor) de SiO₂, um isolante. Sobre o isolante, colocamos um metal qualquer. Consideramos que o semicondutor está aterrado e aplicamos uma voltagem positiva ao metal, a chamada gate voltage V_G . O papel do isolante é impedir que cargas do metal passem para o semicondutor. Quando aplicamos $V_G > 0$ ao metal, geramos um campo elétrico no sistema que atrai cargas positivas do metal para a interface entre o condutor e o isolante. Mais ainda, isto expulsa cargas positivas da interface entre o isolante e o semicondutor. As cargas positivas do semicondutor de tipo p são buracos, então neste modo, chamado modo de redução, os buracos são expulsos da interface entre o isolante e o semicondutor. Lá, permanecem apenas os íons negativos de boro. Em termos de bandas de energia, próximo à interface isolante-semicondutor, as bandas de energia do semicondutor se curvam para baixo, fazendo a banda de valência ficar bem mais longe do nível de Fermi. E como se, neste regime, o semicondutor não estivesse dopado, possuindo assim poucos portadores de carga livres.

Aumentando a voltagem V_G ainda mais, expulsamos buracos de uma região ainda maior, próxima à interface isolante-semicondutor. Agora, o campo elétrico é suficientemente forte para que as cargas positivas na interface metal-isolante atraiam elétrons livres do material para a interface isolante-semicondutor. Em termos de bandas de energia, a voltagem curva os níveis de tal maneira que, agora, a energia de Fermi se aproxima mais do

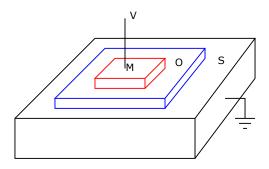


Figura 11: Configuração básica de um MOSFET.

início da banda de condução do que da banda de valência. Temos então que, na região próxima à interface isolante-semicondutor, chamada de camada de inversão, o semicondutor se comporta como um tipo n. Por causa disso, esse modo é chamado modo de inversão. Ou seja, neste regime, ao longo da interface isolante-semicondutor, temos elétrons livres.

A camada de inversão, normalmente, possui uma altura de 10 nm. Por causa disso, podemos considerar o campo elétrico como sendo constante nessa direção. Ou seja, o potencial elétrico cresce linearmente na direção perpendicular à interface isolante-semicondutor, tendo intensidade infinita no isolante. Assim, os elétrons estão confinados em um poço de potencial triangular nessa direção. Os elétrons então se movem livres ao longo do plano da interface e são confinados a um poço de potencial na direção perpendicular à mesma. Isso implica que estados possíveis na direção perpendicular são quantizados. Se pudermos desprezar excitações dos elétrons de um estado a outro nessa direção, o que é possível para camadas de inversão suficientemente pequenas, temos então que, efetivamente, os elétrons se movem apenas em duas dimensões, ao longo da interface.

A densidade de elétrons na interface pode ser controlada pela voltagem V_G . Como a condutividade na interface depende da densidade de elétrons, podemos controlar a condutividade através da voltagem V_G . Isso significa que podemos utilizar o Si MOSFET como um transistor.

Na camada de inversão, além dos elétrons livres, permanecem os íons negativos de boro, que estão fixos na rede cristalina. Estes íons agem como impurezas, espalhando os elétrons para direções aleatórias. Isso impossibilita o estudo do sistema à densidades muito baixas de elétrons na camada de inversão, pois o efeito do espalhamento aleatório se torna muito forte. É costume considerar uma densidade de elétrons pelo menos da ordem de $10^{11}~{\rm cm}^{-2}$.

Para mitigar o efeito do espalhamento aleatório e obter um sistema mais puro de elétrons bidimensionais, consideramos uma $heterojun \tilde{ao} Al_x Ga_{1-x} As$ -

GaAs. GaAs é um isolante tetravalente, em média, e $Al_xGa_{1-x}As$ é obtido substituindo alguns átomos de Ga por átomos de Al. $Al_xGa_{1-x}As$ possui um gap de energia maior que GaAs. A heterojunção é construída unindo uma camada de $Al_xGa_{1-x}As$ com uma camada de GaAs. Dopando $Al_xGa_{1-x}As$ com doadores, sua energia de Fermi fica próxima à sua banda de condução, isto é, os elétrons doados possuem energia da ordem da energia de condução. Esta energia é maior que a menor energia de condução do GaAs, o que significa que os elétrons que estão próximos à interface $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs vão para a banda de condução do GaAs. Como carga negativa vai de um material a outro, GaAs fica carregado negativamente, enquanto que $Al_xGa_{1-x}As$ fica carregado positivamente. Isso significa que, em algum momento, o fluxo de elétrons se interrompe, e temos elétrons livres em GaAs próximos à interface $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs. Pelos mesmos motivos considerados no caso do Si MOSFET, os elétrons livres na interface $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs se movem apenas em um plano bidimensional, i.e., ao longo da interface. Como os doadores positivamente ionizados permanecem em $Al_xGa_{1-x}As$, não há impurezas na interface para espalhar aleatoriamente os elétrons. A densidade de elétrons na interface costuma ser semelhante àquela do Si MOSFET.

Vale ressaltar que, apesar de chamarmos os elétrons na interface tanto do Si MOSFET quanto da heterojunção ${\rm Al}_x{\rm Ga}_{1-x}{\rm As}$ -GaAs de elétrons livres, eles ainda sofrem ação de alguns potenciais. Existe o espalhamento de Coulomb entre elétrons nos dois casos, além do potencial gerado pelas impurezas no Si MOSFET.

Agora que sabemos como produzir elétrons que se movem apenas em duas dimensões, estamos em posição de descrever os experimentos que descobriram os efeitos Hall quânticos.

O efeito Hall quântico inteiro. Em artigo publicado em 1980, K. von Klitzing, G. Dorda e M. Pepper [13] descreveram medidas de voltagem de Hall, resistência diagonal e resistência de Hall em função da voltagem de gate em Si MOSFET's de diferentes dimensões. Aqui, vamos considerar que resistência é igual à resistividade, o que é de fato verdade no caso da resistividade de Hall ρ_{xy} . Essas medidas foram feitas no regime quântico, isto é, a baixas temperaturas (de 1.2 K a 4.2 K) e sob campos magnéticos muito intensos (de 13 T a 18 T). Como a voltagem de gate controla a densidade de elétrons na camada de inversão, essas medidas são, essencialmente, voltagem de Hall e resistência em função da densidade de elétrons. Das equações (2.1.14) e (2.1.15), vemos que a teoria clássica prevê que a resistência é inversamente proporcional à densidade de elétrons. O que os autores encontraram é que a resistência de Hall ρ_{xy} apresenta plateaus, nos quais se mantém constante enquanto a densidade de elétrons varia. Nessas regiões, a resistência diagonal ρ_{xx} se anula. Mais ainda, o valor da resistência de Hall nos plateaus é dado

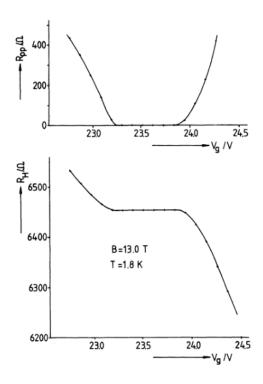


Figura 12: Resistência diagonal e resistência de Hall em função da densidade de elétrons. Figura retirada de [13].

por

$$\rho_{xy} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{\nu},\tag{2.2.1}$$

onde $\nu \in \mathbb{Z}$ é um número inteiro. Isto é, a condutividade de Hall é quantizada em múltiplos inteiros de e^2/h . Os resultados de von Klitzing et al. são mostrados na figura 12.

O IQHE também foi observado em heterojunções $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs [14]. Na figura 13, temos uma medida da resistência em função do campo aplicado a uma temperatura de 50 mK. Vemos que, para campos pequenos, o gráfico se parece com a previsão clássica mostrada na figura 9, isto é, a resistência de Hall é aproximadamente linear no campo B, enquanto que a resistência diagonal é aproximadamente constante. No entanto, quando aumentamos o campo, observamos o aparecimento dos plateaus na resistência de Hall, que se tornam mais evidentes em campos muito intensos. Na passagem de um plateau para outro, a resistência diagonal é diferente de zero, diminuindo com o aumento do campo. Em cada plateau, a resistência diagonal é nula.

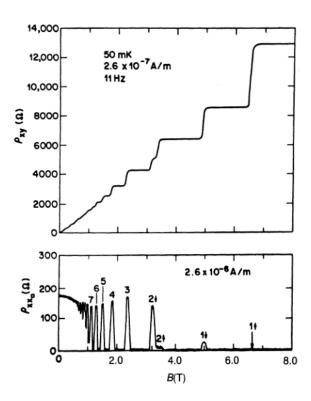


Figura 13: Resistência de Hall e resistência diagonal em função do campo magnético aplicado B. Figura retirada de [14].

Vemos que, realmente, a previsão clássica passa longe de ser acurada no regime quântico.

O efeito Hall quântico fracionário. Como vimos, o efeito Hall quântico inteiro é observado em sistemas onde os elétrons estão confinados a se moverem em duas dimensões. Estes sistemas são conhecidos na literatura como sistemas de elétrons bidimensionais. Os dois sistemas de elétrons bidimensionais mais importantes para nós são o Si MOSFET e a heterojunção $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs. Um característica do Si MOSFET é a presença dos íons negativos na camada de inversão, que agem como impurezas, fontes de espalhamentos aleatórios. Nesse material, os elétrons não possuem tanta mobilidade. Amostras mais limpas, onde os elétrons possuem mais mobilidade, podem ser produzidas a partir de heterojunções $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs. Em artigo publicado em 1982, D. C. Tsui, H. L. Stormer e A. C. Gossard observaram [1], em uma amostra de $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs de alta mobilidade eletrônica, um efeito Hall quântico diferente do IQHE. Os autores fizeram medidas de resistência em função do campo magnético aplicado a baixas temperaturas, e obtiveram o gráfico reproduzido na figura 14.

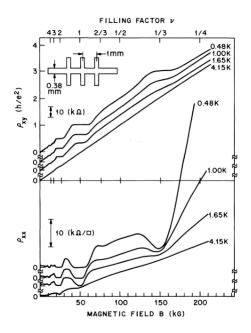


Figura 14: Resistividade em função do campo magnético aplicado a baixas temperaturas. Figura retirada de [1].

Analisando o gráfico, vemos que, a uma temperatura de 4.15 K, a resistividade de Hall ρ_{xy} se comporta como o esperado pela previsão clássica, isto é, cresce linearmente com o campo magnético. Ao mesmo tempo, a resistividade ρ_{xx} , para campos baixos, é aproximadamente constante e muito pequena, como a teoria clássica também prediz. Abaixando a temperatura para 1.65 K, vemos o surgimento de plateaus em ρ_{xy} , no qual a condutividade de Hall é um múltiplo inteiro de e^2/h , um indicativo do IQHE. Nestes plateaus, $\rho_{xx}\approx 0$. No entanto, diminuindo ainda mais a temperatura, para campos magnéticos bastante intensos, vemos o surgimento de um plateau adicional no qual a resistividade de Hall é um múltiplo inteiro de h/e^2 ($3h/e^2$, para ser mais exato), o que significa que a condutividade de Hall é uma fração de e^2/h ($e^2/3h$, para ser mais exato). Este é o $efeito\ Hall\ quântico\ fracionário\ (FQHE, da sigla em inglês). Neste plateau, também temos que <math>\rho_{xx}\approx 0$, crescendo quase que exponencialmente quando o plateau acaba.

É importante tentar visualizar o que acontece com os elétrons em cada plateau. Temos que, em qualquer plateau, $\rho_{xx} = 0$ e $\rho_{xy} = h/e^2\nu$, onde $\nu \in \mathbb{Z}$ no IQHE e $\nu \in \mathbb{Q}$ no FQHE. Como $\sigma = \rho^{-1}$, temos que

$$\sigma_{xx} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2}, \ \sigma_{xy} = \frac{-\rho_{xy}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2}.$$

Daí, em qualquer plateau, $\sigma_{xx}=0,\ \sigma_{xy}=-\nu e^2/h.$ Assim, na direção \hat{x} ,

a resistência e a condutividade são ambas nulas. Isso significa que não há corrente fluindo nessa direção e também não há dissipação de energia. Na direção diagonal, há fluxo de corrente e também há dissipação de energia.

2.3 Partículas Quânticas na Presença de um Campo Magnético

Os dois efeitos Hall quânticos envolvem elétrons bidimensionais se movendo na presença de um campo magnético muito intenso. Sabemos que, se o elétron fosse uma partícula clássica, seu movimento seria circular, com uma frequência de cíclotron ω_B muito alta e um raio R_{ω_B} muito pequeno. No entanto, o elétron é uma partícula quântica. Devemos então determinar como uma partícula quântica carregada se move na presença de um campo magnético.

 $Niveis\ de\ Landau$. Considere um elétron bidimensional de massa m e carga -e movendo-se em uma superfície plana de dimensões $L_x\times L_y$, na presença de um campo magnético $\mathbf{B}=B\hat{z}$ e de um campo elétrico $\mathbf{E}=E\hat{x}$. A Hamiltoniana desse sistema é dada por

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + e\mathbf{A} \right)^2 + eEx, \qquad (2.3.1)$$

onde \mathbf{p} é o momento canônico e $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ é o potencial vetor. Podemos escolher vários vetores \mathbf{A} que satisfazem a equação $\nabla \times \mathbf{A} = B\hat{z}$. Uma possível escolha é

$$\mathbf{A} = xB\hat{y}.\tag{2.3.2}$$

Escolhendo tal \mathbf{A} , dizemos que estamos no Landau gauge. Assim, a Hamiltoniana (2.3.1) se torna

$$H = \frac{1}{2m} \left[p_x^2 + (p_y + eBx)^2 \right] + eEx, \tag{2.3.3}$$

onde utilizamos que $[x, p_y] = 0$. Note que esta Hamiltoniana apresenta invariância sob translações na direção \hat{y} , isto é, $[H, p_y] = 0$. Ou seja, auto-estados de p_y também são auto-estados de energia. Como as auto-funções de p_y são ondas planas e^{ik_yy} , onde

$$k_y = \frac{2\pi}{L_y}k, \ k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

seja

$$\psi_k(x,y) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{ik_y y} \chi_k(x)$$

a solução da equação de Schrödinger $H\psi_k(x,y)=\epsilon\psi_k(x,y)$. Temos então que χ_k deve satisfazer a equação

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left[p_x^2 + (\hbar k_y + eBx)^2 \right] + eEx \right\} \chi_k(x) = \epsilon \chi_k(x),$$

onde ϵ é a energia do elétron. Para resolvê-la, reescrevemos

$$\frac{1}{2m}(\hbar k_y + eBx)^2 = \frac{e^2B^2}{2m}(\frac{\hbar k_y}{eB} + x)^2.$$

Definindo o comprimento magnético

$$l_B^2 = \frac{\hbar}{eB},\tag{2.3.4}$$

e notando que $e^2B^2=\omega_B^2m^2$, temos que

$$\frac{1}{2m}(\hbar k_y + eBx)^2 = \frac{m\omega_B^2}{2}(x + k_y l_B^2)^2.$$

Agora

$$\frac{1}{2m}(\hbar k_y + eBx)^2 + eEx = \frac{m\omega_B^2}{2}(x + k_y l_B^2)^2 + eEx$$

$$= \frac{m\omega_B^2}{2} \left[x^2 + 2x \left(k_y l_B^2 + \frac{E}{B\omega_B} \right) + k_y^2 l_B^4 \right]$$

$$= \frac{m\omega_B^2}{2} \left\{ \left[x + \left(k_y l_B^2 + \frac{E}{B\omega_B} \right) \right]^2 - 2k_y l_B^2 \frac{E}{B\omega_B} - \frac{E^2}{B^2 \omega_B^2} \right\},$$

onde completamos o quadrado $\left(k_y l_B^2 + \frac{E}{B\omega_B}\right)^2$. Definindo

$$x_0(k_y) = -\left(k_y l_B^2 + \frac{E}{B\omega_B}\right),$$

$$\epsilon_0(k_y) = -\left(2k_y l_B^2 \frac{E}{B\omega_B} + \frac{E^2}{B^2 \omega_B^2}\right) = -\frac{2mE}{e^2 B^3} \left(\frac{1}{2} m \frac{E}{B} + \hbar k_y\right),$$

obtemos a equação

$$\left[\frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{m\omega_B^2}{2}(x - x_0(k_y))^2\right]\chi_k(x) = (\epsilon - \epsilon_0(k_y))\chi_k(x), \qquad (2.3.5)$$

que nada mais é que a equação de um oscilador harmônico quântico unidimensional, de frequência ω_B e centrado em $x_0(k_y)$. Isto era de se esperar,

pois o caso clássico também se resume a um oscilador harmônico. Segue que $\epsilon - \epsilon_0(k_u)$ é dado por

$$\epsilon - \epsilon_0(k_y) = \hbar \omega_B \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

onde $n = 0, 1, 2, \dots$ Ou seja, a energia ϵ é igual a

$$\epsilon_{n,k} = \hbar\omega_B \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{2mE}{e^2 B^3} \left(\frac{1}{2} m \frac{E}{B} + \hbar k_y \right), \tag{2.3.6}$$

e depende de dois números quânticos, n e k. O número n costuma ser chamado de $nivel\ de\ Landau$. As funções de onda $\chi_{n,k}(x)$ que resolvem a equação (2.3.5) são dadas por

$$\chi_{n,k}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/2}}} H_n\left(\frac{1}{l_B}(x - x_0(k_y))\right) e^{-\frac{1}{2l_B^2}(x - x_0(k_y))^2}, \tag{2.3.7}$$

onde H_n é o polinômio de Hermite de grau n. Logo, o elétron bidimensional é descrito pela função de onda

$$\psi_{n,k}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/2} L_y}} H_n\left(\frac{1}{l_B} (x - x_0(k_y))\right) e^{-\frac{1}{2l_B^2} (x - x_0(k_y))^2} e^{ik_y y}.$$
(2.3.8)

Note que o comprimento magnético l_B serve como uma escala típica de distância. Para B=1 T, l_B é da ordem de 10^{-8} m. A Gaussiana $\exp\left[-\frac{1}{2l_B^2}(x-x_0(k_y))^2\right]$ nos diz que, na direção \hat{x} , o elétron está exponencialmente localizado em torno do ponto $x_0(k_y)$, com um desvio padrão de l_B . Como l_B é inversamente proporcional à raiz quadrada de B, quanto mais intenso o campo magnético, menor o desvio padrão em torno do ponto médio $x_0(k_y)$ e mais localizado o elétron se encontra. Para n grande, os polinômios de Hermite transladam o ponto médio em torno do qual a função de onda se localiza para longe de $x_0(k_y)$. Esse comportamento oscila ao longo do eixo \hat{y} como uma onda plana.

Vamos analisar o caso em que B >> E. Nesta situação, o segundo termo da (2.3.6) é desprezível, e temos que $\epsilon_n \approx \hbar \omega_B (n+1/2)$. Ou seja, para campos magnéticos muito mais intensos que o campo elétrico, a energia do elétron passa a ser a energia de um oscilador harmônico quântico simples, e depende apenas de um número quântico, o nível de Landau n. No entanto, a função de onda é dada por

$$\psi_{n,k}(x,y) \approx \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/2} L_y}} H_n\left(\frac{1}{l_B} (x + k_y l_B^2)\right) e^{-\frac{1}{2l_B} (x + k_y l_B^2)^2} e^{ik_y y},$$

e ainda depende do número quântico k. Logo, para cada n, temos muitos estados possíveis do elétron, isto é, temos uma degenerescência altíssima em cada nível de Landau.

Podemos calcular o número de estados possíveis em cada nível de Landau. Nos primeiros níveis, na direção \hat{x} , a função de onda se concentra na vizinhança do ponto $x=-k_yl_B^2$. Então, como o elétron se move ao longo de uma área $A=L_xL_y$, com $-L_x/2 \le x \le L_x/2$ e $-L_y/2 \le y \le L_y/2$, é razoável assumir que

$$|k_y l_B^2| \le \frac{L_x}{2},$$

isto é,

$$|k_y| \le \frac{L_x}{2l_B^2}.$$

Ou seja, o intervalo de valores que k_y pode assumir tem comprimento L_x/l_B^2 . Como o espaçamento entre k_y 's consecutivos é $2\pi/L_y$, o número de valores de k_y dentro desse intervalo é

$$N = \frac{L_x}{l_B^2} / \frac{2\pi}{L_y} = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2} = \frac{A}{2\pi l_B^2}.$$

Assim, o número de estados que cabem em um nível de Landau (baixo) é macroscópico, proporcional à área da amostra. Note que N é a razão entre duas áreas, A e $2\pi l_B^2$. É como se, em cada nível de Landau, tivéssemos estados de elétrons localizados em micro-áreas $2\pi l_B^2$, e a degenerescência é o número de micro-áreas que cabem na área total A. Como l_B^2 é inversamente proporcional ao campo magnético, N cresce com a intensidade do campo aplicado.

Mais ainda, definindo o quantum de fluxo magnético

$$\Phi_0 = \frac{h}{e},\tag{2.3.9}$$

podemos escrever

$$N = \frac{AB}{\Phi_0}.$$

Isto é, a degenerescência é o número de quanta de fluxo magnético Φ_0 que cabem no fluxo total AB. O quantum de fluxo Φ_0 pode ser interpretado como o fluxo magnético contido em uma área $2\pi l_B^2$.

Agora, para $E \sim B$, temos que a degenerescência é levantada. A energia depende tanto de n quanto de k. Cada estado $\psi_{n,k}$ corresponde a uma única energia $\epsilon_{n,k}$.

 $Gauge\ sim\'etrico$. Para resolver a equação de Schrödinger, fixamos o gauge escolhendo uma forma funcional particular para o potencial vetor ${\bf A}$. No entanto, poderíamos ter escolhido qualquer outro gauge, como por exemplo o $gauge\ sim\'etrico$

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2}(x, y, 0) \times (0, 0, B) = -\frac{1}{2}yB\hat{x} + \frac{1}{2}xB\hat{y}.$$
 (2.3.10)

Neste gauge, a Hamiltoniana não é mais invariante sob translações. No entanto, ainda temos invariância sob rotações em torno do eixo \hat{z} . Esta escolha de potencial vetor é interessante pois nos permite resolver a equação de Schrödinger utilizando métodos puramente algébricos. Vamos nos concentrar no caso em que não temos um campo elétrico aplicado (E=0 na Hamiltoniana (2.3.1)). Temos que

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 = \frac{1}{2m} \pi^2,$$
 (2.3.11)

onde

$$\pi = \mathbf{p} + e\mathbf{A} \tag{2.3.12}$$

é o momento mecânico $\boldsymbol{\pi}=m\dot{\boldsymbol{r}},\,\boldsymbol{r}=(x,y),$ que satisfaz as seguintes relações de comutação:

$$[\pi_x, \pi_x] = [\pi_y, \pi_y] = 0,$$

$$[\pi_x, \pi_y] = [p_x + eA_x, p_y + eA_y] = [p_x - \frac{1}{2}yBe, p_y + \frac{1}{2}yBe],$$

isto é,

$$[\pi_x, \pi_y] = -i\hbar Be.$$

Esta última relação de comutação nos indica que talvez possamos definir novos operadores não-hermitianos, a e a^{\dagger} , tais que

$$[a, a^{\dagger}] = 1,$$

como no caso do oscilador harmônico simples. Sejam, então,

$$a = \alpha(\pi_x + i\pi_y), \tag{2.3.13}$$

$$a^{\dagger} = \alpha^* (\pi_x - i\pi_y), \tag{2.3.14}$$

onde $\alpha \in \mathbb{C}$ é uma constante a ser determinada. Temos que

$$[a, a^{\dagger}] = |\alpha|^2 [\pi_x - i\pi_y, \pi_x + i\pi_y]$$

$$= |\alpha|^2 (i[\pi_x, \pi_y] - i[\pi_y, \pi_x])$$
$$= |\alpha|^2 i(-i\hbar Be - i\hbar Be)$$
$$= 2|\alpha|^2 \hbar Be.$$

Então, para que $[a,a^{\dagger}]=1$, tomamos $\alpha=\sqrt{1/2\hbar Be}$. Ou seja, conseguimos expressar o momento mecânico π em termos de operadores escada a,a^{\dagger} , semelhantes àqueles que podem ser definidos para diagonalizar a Hamiltoniana do oscilador harmônico simples. O espaço de Hilbert sobre o qual os operadores a,a^{\dagger} agem é conhecido: existe um estado de vácuo $|0\rangle$, aniquilado por a, isto é, $a|0\rangle=0$, sobre o qual podemos aplicar a^{\dagger} para obter outros estados. Um estado genérico $|n\rangle$, onde n=0,1,2,..., é tal que

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \ a^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle,$$

$$|n\rangle = \frac{(a^{\dagger})^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle.$$

Expressando π_x e π_y em termos de a e a^{\dagger} , temos que

$$\pi_x = \sqrt{\frac{\hbar Be}{2}}(a+a^{\dagger}), \ \pi_y = i\sqrt{\frac{\hbar Be}{2}}(a-a^{\dagger}).$$

Utilizando a relação $[a, a^{\dagger}] = 1$, temos que

$$\pi_x^2 + \pi_y^2 = \frac{\hbar Be}{2} \left((a^{\dagger})^2 + a^{\dagger}a + aa^{\dagger} + a^2 - (a^{\dagger})^2 + a^{\dagger}a + aa^{\dagger} - a^2 \right)$$
$$= \frac{\hbar Be}{2} (4a^{\dagger}a + 2),$$

e então, a Hamiltoniana (2.3.11) pode ser escrita como

$$H = \hbar \omega_B \left(a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right), \tag{2.3.15}$$

que é exatamente a Hamiltoniana de um oscilador harmônico simples de frequência ω_B . Os níveis de energia deste sistema são dados por

$$\epsilon_n = \hbar \omega_B \left(n + \frac{1}{2} \right), \tag{2.3.16}$$

e cada $n \in \mathbb{N}$ define um nível de Landau.

Chegamos ao mesmo resultado que havíamos obtido utilizando o gauge de Landau no caso em que B >> E. Isto significa que, de fato, o gauge que escolhemos não tem importância física. No entanto, aqui a degenerescência

dos níveis de Landau não está explícita ainda. Isto significa que existe alguma simetria escondida no sistema, que dá origem à degenerescência. Para encontrá-la, devemos achar mais um observável que comuta com a Hamiltoniana.

Definimos o operador

$$\tilde{\boldsymbol{\pi}} = \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A},\tag{2.3.17}$$

que satisfaz as seguintes relações de comutação no gauge simétrico:

$$[\tilde{\pi}_x, \tilde{\pi}_x] = [\tilde{\pi}_y, \tilde{\pi}_y] = 0,$$
 (2.3.18)

$$[\tilde{\pi}_x, \tilde{\pi}_y] = [p_x + \frac{e}{2}yB, p_y - \frac{e}{2}xB] = i\hbar eB.$$
 (2.3.19)

No gauge simétrico, este operador comuta com a Hamiltoniana (2.3.11). De fato,

$$[\pi_x, \tilde{\pi}_x] = [p_x + eA_x, p_x - eA_x] = \frac{e}{2}B[p_x, y] + \frac{e}{2}B[y, p_x] = 0,$$

$$[\pi_x, \tilde{\pi}_y] = [p_x + eA_x, p_y - eA_y] = \frac{e}{2}Bi\hbar - \frac{e}{2}Bi\hbar = 0,$$

$$[\pi_y, \tilde{\pi}_x] = [p_y + \frac{e}{2}xB, p_x + \frac{e}{2}By] = -\frac{e}{2}Bi\hbar + \frac{e}{2}Bi\hbar = 0,$$

$$[\pi_y, \tilde{\pi}_y] = [p_y + \frac{e}{2}xB, p_y - \frac{e}{2}Bx] = 0,$$

ou seja,

$$[\boldsymbol{\pi}, \tilde{\boldsymbol{\pi}}] = 0$$

e então

$$[H, \tilde{\boldsymbol{\pi}}] = 0.$$

Mas qual é a interpretação física do operador $\tilde{\pi}$? Para responder isso, voltamos ao movimento bidimensional de uma partícula clássica em um campo magnético. Suas coordenadas (x,y) evoluem no tempo de acordo com as equações

$$x(t) = x_0 + R_{\omega_B} \sin(\omega_B t + \phi),$$

$$y(t) = y_0 - R_{\omega_B} \cos(\omega_B t + \phi),$$

onde o ponto (x_0, y_0) representa o centro da órbita. Resolvendo para (x_0, y_0) , temos que

$$x_0 = x(t) - R_{\omega_B} \sin(\omega_B t + \phi) = x - \frac{\dot{y}}{\omega_B},$$

$$y_0 = y(t) + R_{\omega_B} \cos(\omega_B t + \phi) = y + \frac{\dot{x}}{\omega_B}.$$

Podemos escrever tudo em termos do momento mecânico $\pi = m\dot{r}$:

$$x_0 = x - \frac{\pi_y}{m\omega_B},$$

$$y_0 = y + \frac{\pi_x}{m\omega_B}.$$

A partir daqui, consideramos as posições e os momentos como operadores quânticos. No gauge simétrico, podemos escrever x e y em termos de A_x e A_y , e temos como resultado que

$$x_0 = \frac{1}{eB}(2eA_y - \pi_y),$$

$$y_0 = \frac{1}{eB}(-2eA_x + \pi_x).$$

Finalmente, como $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}$, segue que

$$x_0 = -\frac{1}{eB}\tilde{\pi}_y,$$

$$y_0 = \frac{1}{eB}\tilde{\pi}_x.$$

Ou seja, $\tilde{\pi}$ é proporcional ao centro da órbita. Da relação de comutação (2.3.19),

$$[x_0, y_0] = -\frac{1}{e^2 R^2} [\tilde{\pi}_y, \tilde{\pi}_x] = i \frac{\hbar}{eR} = i l_B^2,$$

o que significa que as coordenadas x_0 e y_0 do centro da órbita não comutam. O grau de não-comutatividade é dado pelo comprimento magnético, que já havíamos interpretado como um desvio padrão da posição do elétron em relação à posição média (para níveis de Landau suficientemente baixos).

A relação de comutação (2.3.19) indica que também podemos escrever combinações lineares de operadores $b = \beta(\tilde{\pi}_x + i\tilde{\pi}_y), b^{\dagger} = \beta^*(\tilde{\pi}_x - i\tilde{\pi}_y)$, onde $\beta \in \mathbb{C}$, de modo que $[b, b^{\dagger}] = 1$. Calculando o comutador $[b, b^{\dagger}]$, é fácil ver que devemos tomar $\beta = \sqrt{1/2\hbar Be}$. Temos então mais um conjunto de operadores escada, b e b^{\dagger} , que agem sobre um espaço de Hilbert conhecido: temos um estado de vácuo $|0\rangle$ que é aniquilado pelo operador b, b $|0\rangle = 0$, e a partir do qual podemos construir outros estados $|k\rangle$, $k \in \mathbb{N}$, utilizando b^{\dagger} ,

$$|k\rangle = \frac{(b^{\dagger})^k}{\sqrt{k!}} |0\rangle.$$

Estes estados são tais que

$$b|k\rangle = \sqrt{k}|k-1\rangle, \ b^{\dagger}|k\rangle = \sqrt{k+1}|k+1\rangle.$$

Assim, um estado genérico de um elétron bidimensional sob ação de um campo magnético é dado por

$$|n,k\rangle = \frac{(a^{\dagger})^n (b^{\dagger})^k}{\sqrt{n!}\sqrt{k!}} |0,0\rangle, \qquad (2.3.20)$$

e depende de dois números quânticos, n e k, como no gauge de Landau. Como a energia não depende do número k, temos uma enorme degenerescência, que pode ser calculada utilizando a interpretação de $\tilde{\pi}$ como centro da órbita. Como $[x_0, y_0] = il_B^2$, não podemos medir x_0 e y_0 simultâneamente com arbitrária precisão. Temos uma incerteza de pelo menos $\Delta x_0 \Delta y_0 = l_B^2$. Quantos estados com tal área de incerteza cabem em uma área total de $A = L_x L_y$? Esse número é dado por $N = A/2\pi l_B^2$, e é exatamente o número de estados possíveis em cada um dos níveis de Landau mais baixos.

O gauge simétrico também facilita o cálculo das funções de onda do elétron. Vamos considerar o nível de Landau mais baixo (LLL, da sigla do inglês), que corresponde ao estado fundamental, de energia $\epsilon_0 = \hbar \omega_B/2$. Este estado de vácuo $|0\rangle$ é aniquilado por a, i.e., $a|0\rangle = 0$. Vamos escrever a como um operador diferencial. Temos que

$$\pi_x + i\pi_y = p_x + ip_y + e(A_x + iA_y)$$
$$= -i\hbar(\partial_x + i\partial_y) + \frac{Be}{2}(-y + ix) = -i\hbar(\partial_x + i\partial_y) + i\frac{Be}{2}(x + iy).$$

A partir daqui, é conveniente passar para coordenadas complexas z = x + iy, $\bar{z} = x - iy$. Nestas coordenadas, é fácil ver que

$$\partial_x = \partial_z + \partial_{\bar{z}},$$

$$\partial_y = i(\partial_z - \partial_{\bar{z}}).$$

Em termos de coordenadas complexas,

$$\pi_x + i\pi_y = -2i\hbar\partial_{\bar{z}} + i\frac{eB}{2}z = -2ieB\left(l_B^2\partial_{\bar{z}} - \frac{1}{4}z\right).$$

Segue que

$$a\psi_{LLL}(z,\bar{z}) = 0 \Leftrightarrow \left(l_B^2 \partial_{\bar{z}} - \frac{1}{4}z\right)\psi_{LLL}(z,\bar{z}) = 0,$$

isto é,

$$\left(\partial_{\bar{z}} - \frac{1}{4l_B^2} z\right) \psi_{LLL}(z, \bar{z}) = 0. \tag{2.3.21}$$

A solução desta equação é

$$\psi_{LLL}(z,\bar{z}) = f(z)e^{-\frac{1}{4l_B^2}|z|^2},$$
(2.3.22)

onde f(z) é qualquer função holomórfica (que depende apenas de z).

A função f(z) específica depende de qual estado $|0,k\rangle$ estamos falando. Para construir tais estados, escrevemos os operadores b e b^{\dagger} em forma diferencial:

$$b = -i\sqrt{2}l_B \left(\partial_z + \frac{\bar{z}}{4l_B^2}\right), \ b^{\dagger} = -i\sqrt{2}l_B \left(\partial_{\bar{z}} - \frac{z}{4l_B^2}\right)$$
 (2.3.23)

O estado mais baixo, k=0, é aniquilado tanto por a quanto por b. A única solução é

$$\psi_{LLL,k=0}(z,\bar{z}) = \frac{1}{2\pi l_B^2} e^{-\frac{1}{4l_B^2}|z|^2}.$$
 (2.3.24)

Para construir outros estados no LLL, basta aplicar b^{\dagger} nesta função de onda. É fácil ver que cada aplicação de b^{\dagger} corresponde a uma multiplicação por $i\sqrt{2}(z/2l_B)$, o que significa que um estado $|0,k\rangle$ arbitrário no LLL tem como função de onda

$$\psi_{LLL,k}(z,\bar{z}) = \frac{1}{2\pi l_B^2} \left(\frac{i}{\sqrt{2}}\right)^k \left(\frac{z}{l_B}\right)^k e^{-\frac{1}{4l_B^2}|z|^2}.$$
 (2.3.25)

Estes estados são auto-estados do momento angular na direção \hat{z} . Para ver isso, escrevemos

$$J_z = i\hbar (x\partial_y - y\partial_x) = \hbar (z\partial_z - \bar{z}\partial_{\bar{z}}),$$

como pode ser facilmente verificado. Segue que

$$J_z \psi_{LLL,k} = \hbar k \psi_{LLL,m}.$$

Ou seja, o número quântico k pode ser interpretado como momento angular na direção \hat{z} .

Falando em momento angular, devemos explicar a razão pela qual não consideramos o spin do elétron em nenhum dos cálculos acima. Na presença de um campo magnético B, acontece o efeito Zeeman, no qual surge um gap de $\Delta = 2\mu_B B$ entre a energia do estado com spin para cima e a energia do estado com spin para baixo, onde $\mu_B = e\hbar/2m$ é o magneton de Bohr. Para campos muito intensos, esse gap é muito largo, o que significa que, à baixas energias, quase nunca há uma transição entre estados de spin. Como o spin

do elétron está, digamos, congelado em um único estado, não precisamos levar em conta seu papel na dinâmica do sistema.

Fase de Berry. Para continuarmos analisando o comportamento quântico de partículas na presença de um campo magnético, vamos precisar entender o fenômeno da fase de Berry. O campo magnético externo é representado como um parâmetro da Hamiltoniana do sistema. Isto significa que os autoestados da Hamiltoniana também são parametrizados pelo campo magnético. Suponha que preparamos o sistema em um determinado auto-estado não-degenerado da Hamiltoniana. O teorema adiabático [15] nos diz que, se variarmos o campo magnético no tempo de forma suficientemente lenta, o auto-estado do sistema permanece o mesmo se o qap de energia entre este e os estados vizinhos não se anular. Ou seja, variando o campo magnético no tempo mas no fim fazendo com que ele volte ao seu valor inicial, de modo que as condições do teorema adiabático sejam satisfeitas, sabemos que o estado resultante será equivalente ao estado inicial, a menos de um fator de fase. Esta fase é a chamada fase de Berry, e depende da trajetória que percorremos no espaço dos campos magnéticos. Vamos determiná-la para um caso geral.

Considere um sistema descrito por uma Hamiltoniana $H(\lambda^a)$ que depende de parâmetros λ^a , a=1,...,d. Por exemplo, o sistema pode estar imerso em um campo magnético \boldsymbol{B} , e os parâmetros λ^a seriam as três componentes de \boldsymbol{B} . Suponha que o estado fundamental do sistema seja não-degenerado e com energia $E_0=0$. Em t=0, os parâmetros da Hamiltoniana são $\lambda^a(t=0)=\lambda^a_0$ e preparamos o sistema em seu único estado fundamental $|n(\lambda^a_0)\rangle$, i.e., $H(\lambda^a_0)|n(\lambda^a_0)\rangle=0$. Para 0< t< t', variamos os parâmetros λ^a de modo que estes descrevem uma trajetória $\lambda^a(t)$ no espaço de parâmetros tal que $\lambda^a(0)=\lambda^a(t')=\lambda^a_0$, para todo a. De acordo com o teorema adiabático, em cada ponto da trajetória, o sistema ainda se encontra no estado fundamental, a menos de um fator de fase. Ou seja, no tempo t, o sistema se encontra no estado

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |n(\lambda(t))\rangle,$$

onde $|\psi(t=0)\rangle = |n(\lambda_0)\rangle$ e U(t) é um fator de fase dependente do tempo tal que U(t=0) = 1. Se $|\psi(t)\rangle$ satisfaz a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(\lambda(t)) |\psi(t)\rangle,$$

devemos ter que

$$i\hbar \left(\frac{dU}{dt}\left|n\right\rangle + U\frac{\partial}{\partial\lambda^a}\left|n\right\rangle \frac{d\lambda^a}{dt}\right) = H(\lambda)U\left|n\right\rangle.$$

Como U é apenas um número complexo, $H(\lambda)U|n\rangle = UH(\lambda)|n\rangle = 0$, pois $|n\rangle$ é o estado fundamental. Tomando o produto interno $\langle \psi | \dot{\psi} \rangle$, temos que

$$\langle n|U^*\dot{U}|n\rangle + \langle n|\frac{\partial}{\partial \lambda^a}|n\rangle \dot{\lambda}^a = 0,$$

isto é,

$$U^*\dot{U} = -\langle n|\frac{\partial}{\partial \lambda^a}|n\rangle\,\dot{\lambda}^a.$$

Definindo a conexão de Berry

$$A_a(\lambda) = -i \left\langle n \middle| \frac{\partial}{\partial \lambda^a} \middle| n \right\rangle, \qquad (2.3.26)$$

temos a equação diferencial

$$\dot{U} = -iA_a(\lambda)\dot{\lambda}^a U,$$

cuja solução é

$$U(t) = e^{-i\int_0^t A_a(\lambda(t))\dot{\lambda}^a dt},$$

ou melhor

$$U = e^{-i\oint_C A_a(\lambda)d\lambda^a},\tag{2.3.27}$$

onde C é o caminho fechado descrito pelos parâmetros λ^a . A quantidade

$$\gamma[C] = -\oint_C A_a(\lambda)d\lambda^a \qquad (2.3.28)$$

é a fase de Berry, que depende do caminho percorrido pelos parâmetros, mas não do tempo no qual tal caminho foi descrito.

Note que poderíamos ter escolhido outro estado inicial para calcular a fase de Berry. Por exemplo, poderíamos escolher $|n'(\lambda)\rangle$ que difere de $|n(\lambda)\rangle$ por um fator de fase $e^{i\omega(\lambda)}$ que depende dos parâmetros λ^a , isto é,

$$|n'(\lambda)\rangle = e^{i\omega(\lambda)} |n(\lambda)\rangle.$$

Para essa escolha, a conexão de Berry (2.3.26) é dada por

$$A'_{a}(\lambda) = -i \langle n'(\lambda) | \frac{\partial}{\partial \lambda^{a}} | n'(\lambda) \rangle$$

$$=-ie^{-i\omega(\lambda)}\left\langle n(\lambda)\right|\frac{\partial}{\partial\lambda^a}e^{i\omega(\lambda)}\left|n(\lambda)\right\rangle$$

$$= -ie^{-i\omega(\lambda)} \langle n(\lambda) | \left(i \frac{\partial \omega(\lambda)}{\partial \lambda^a} e^{i\omega(\lambda)} | n(\lambda) \rangle + e^{i\omega(\lambda)} \frac{\partial}{\partial \lambda^a} | n(\lambda) \rangle \right)$$
$$= -i \langle n(\lambda) | \frac{\partial}{\partial \lambda^a} | n(\lambda) \rangle + \partial_a \omega(\lambda),$$

ou seja,

$$A'_{a}(\lambda) = A_{a}(\lambda) + \partial_{a}\omega(\lambda).$$

Assim, estados fisicamente equivalentes estão associados a conexões de Berry que são equivalentes por uma transformação de gauge.

Note ainda que, utilizando o teorema de Stokes, podemos escrever

$$\oint_C A_a(\lambda)d\lambda^a = \int_S (\partial_b A_a - \partial_a A_b) dS^{ab} = \int_S F_{ab}(\lambda)dS^{ab}, \qquad (2.3.29)$$

onde S é a hipersuperfície cuja fronteira é C e

$$F_{ab}(\lambda) = \partial_b A_a(\lambda) - \partial_a A_b(\lambda), \tag{2.3.30}$$

é a curvatura da conexão de Berry. Veremos que de fato existe um fibrado sobre o espaço de parâmetros e que $A_a(\lambda)$ é a conexão nesse fibrado.

Como exemplo, vamos considerar um spin-1/2 na presença de um campo magnético \boldsymbol{B} . A Hamiltoniana do sistema é dada por

$$H = -\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} + B,\tag{2.3.31}$$

onde $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$, $B = |\mathbf{B}|$ e $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ é o vetor de matrizes de Pauli. Escrevendo \mathbf{B} em coordenadas esféricas,

$$\mathbf{B} = (B\sin\theta\cos\phi, B\sin\theta\sin\phi, B\cos\theta),$$

temos que

$$-\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} = -B \sin\theta \cos\phi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - B \sin\theta \sin\phi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - B \cos\theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} -B \cos\theta & -Be^{i\phi} \sin\theta \\ -Be^{-i\phi} \sin\theta & B \cos\theta \end{pmatrix},$$

ou seja,

$$H = -B \begin{pmatrix} \cos\theta - 1 & e^{i\phi}\sin\theta \\ e^{-i\phi}\sin\theta & -\cos\theta - 1 \end{pmatrix}.$$
 (2.3.32)

Diagonalizando essa Hamiltoniana, obtemos os auto-estados

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi}\cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \ |-\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi}\sin(\theta/2) \\ -\cos(\theta/2) \end{pmatrix},$$
 (2.3.33)

e é fácil ver que

$$H \mid + \rangle = 2B \mid + \rangle$$
, $H \mid - \rangle = 0$. (2.3.34)

Nos pólos da esfera, i.e., em $\theta=0$, o ângulo ϕ não é bem definido. Isso significa que os estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$ não possuem fazes bem definidas.

Vamos calcular a conexão de Berry. Como $|-\rangle$ é o estado fundamental, vamos utilizá-lo. Temos que

$$A_{\theta} = -i \left\langle - \left| \frac{\partial}{\partial \theta} \right| - \right\rangle = -i \left(e^{i\phi} \sin \theta / 2 - \cos \theta / 2 \right) \left(\frac{\frac{1}{2} e^{-i\phi} \cos \theta / 2}{\frac{1}{2} \sin \theta / 2} \right) = 0,$$

e que

$$A_{\phi} = -i \left\langle - | \frac{\partial}{\partial \phi} | - \right\rangle = -i \left(e^{i\phi} \sin \theta / 2 - \cos \theta / 2 \right) \begin{pmatrix} -i e^{-i\phi} \sin \theta / 2 \\ 0 \end{pmatrix} = -\sin^2 \frac{\theta}{2}.$$

A curvatura de Berry é dada por

$$F_{\theta\phi} = -\frac{1}{2}\sin\theta.$$

Segue imediatamente que a fase de Berry é dada por

$$\gamma[C] = -\int_{S} F_{ab} dS^{ab} = -\frac{1}{2} \int d\theta d\phi \sin\theta = -\frac{1}{2} \Omega, \qquad (2.3.35)$$

onde $\Omega = 2\pi \int d\theta \sin\theta$ é o ângulo sólido descrito pela trajetória no espaço de parâmetros.

O efeito Aharonov-Bohm. Considere agora um solenóide com um campo magnético $\mathbf{B}=B\hat{z}$ não-nulo em seu interior. Fora do solenóide, $\mathbf{B}=0$. No entanto, existe um fluxo magnético $\Phi=BA$, onde A é a área da secção transversal do solenóide, e temos um potencial vetor

$$\mathbf{A} = A_{\phi}\hat{\phi}, \ A_{\phi} = \frac{\Phi}{2\pi r}$$

que se extende para fora do solenóide. Considere um elétron se movendo em uma trajetória circular fixa de raio r em volta do solenóide. Este elétron não sente a ação do campo B. No entanto, a Hamiltoniana do sistema é dada pelo acoplamento mínimo

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 = \frac{1}{2mr^2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{e\Phi}{2\pi} \right)^2.$$

Podemos facilmente verificar que

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} e^{in\phi}$$

formam auto-estados do sistema, onde $n \in \mathbb{Z}$. As auto-energias são dadas por

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(n + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2,$$

onde $\Phi_0 = 2\pi\hbar/e$. A presença do potencial vetor não-nulo faz com que as auto-energias sejam deslocadas pelo fluxo magnético, mesmo que o elétron nunca interaja com o campo magnético. Mais ainda, suponha que desligamos o campo magnético e iniciamos o elétron no estado n=0. Aumentando o fluxo magnético até $\Phi=\Phi_0$, o estado n=0 se torna o estado n=1. Cada estado n é deslocado para o estado n+1 quando aumentamos o fluxo em múltiplos de Φ_0 . Temos então um chamado fluxo espectral.

Considere agora a situação em que temos um elétron confinado em uma caixa muito pequena. Nesta caixa, ocorrem certas interações que resumiremos no potencial $V(\boldsymbol{x})$. A caixa é suficientemente pequena de modo que o potencial vetor é constante em seu interior. Se a caixa é centralizada no ponto $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0$, a Hamiltoniana do sistema é dada por

$$H = \frac{1}{2m} (\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_0))^2 + V(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0).$$

Realizando uma transformação de gauge de modo a zerar o potencial vetor dentro da caixa, obtemos uma Hamiltoniana

$$H = \frac{1}{2m} \boldsymbol{p}^2 + V(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0),$$

cujo estado fundamental é $\psi = \psi(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0)$. Agora, movemos a caixa ao longo de algum caminho no espaço, de modo que o potencial vetor sentido pelo elétron varia lentamente. Fazendo isso, sabemos que o estado fundamental adquire uma fase

$$\exp\left(-\frac{ie}{\hbar}\int_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_0}^{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}'} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \cdot d\boldsymbol{x}\right).$$

Descrevendo um caminho fechado C ao redor do solenóide, a caixa adquire então a fase de Berry

$$\exp\left(-\frac{ie}{\hbar}\oint_C \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot d\boldsymbol{x}\right).$$

Neste caso, a conexão de Berry é o potencial vetor eletromagnético \boldsymbol{A} . Este é o chamado efeito Aharonov-Bohm.

Fase de Berry não-Abeliana. Quando derivamos a fase de Berry anteriormente, assumimos que o estado fundamental do sistema é único. Podemos nos perguntar então o que acontece quando variamos os parâmetros de uma Hamiltoniana com estados fundamentais degenerados. O teorema adiabático nos diz apenas que o sistema se mantém em um estado de menor energia, mas não afirma qual. Considere então uma Hamiltoniana $H = H(\lambda^a)$, que depende de d parâmetros λ^a , a = 1, ..., d, cujo nível fundamental de energia E = 0 é N-degenerado. Isto é, o subespaço de estados fundamentais do sistema é N-dimensional, de base $\{|n^k(\lambda)\rangle\}$, k = 1, ..., N. Assumindo que, em t = 0, o sistema está em um estado fundamental $|n(\lambda_0)\rangle$. Variando os parâmetros λ^a suavemente, no tempo t, o sistema se encontra no estado

$$|\psi_i(t)\rangle = U_{ij}(t) |n_j(\lambda(t))\rangle,$$

onde $U(t) \in U(N)$ é uma matriz unitária $N \times N$. Ou seja, a evolução dos parâmetros pode levar um estado fundamental em outros. O estado $|\psi_i(t)\rangle$ satisfaz a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = H(\lambda(t)) |\psi\rangle,$$

isto é,

$$\dot{U}_{ij}|n_j\rangle + U_{ij}\frac{\partial}{\partial t}|n_j\rangle = 0,$$

ou seja,

$$\langle n_k | U_{ki}^* \dot{U}_{ij} | n_j \rangle + \langle n_k | U_{ki}^* U_{ij} \frac{\partial}{\partial \lambda^a} | n_j \rangle \dot{\lambda}^a = 0.$$

Segue que

$$U_{ij}^{\dagger}\dot{U}_{jk} = -\langle n_i|\frac{\partial}{\partial\lambda^a}|n_k\rangle\dot{\lambda}^a.$$

Definindo a conexão de Berry não-Abeliana

$$(A_a)_{ij} = -i \langle n_j | \frac{\partial}{\partial \lambda^a} | n_i \rangle, \qquad (2.3.36)$$

segue que

$$U_{ij}^{\dagger}\dot{U}_{jk} = -i(A_a)_{ik}^T\dot{\lambda}^a,$$

cuja solução é dada por

$$U = \mathcal{P}\exp\left(-i\oint A_a d\lambda^a\right). \tag{2.3.37}$$

Resumindo, quando o sistema é degenerado, a evolução que dá origem à fase de Berry pode misturar estados de mesma energia. Neste caso, a fase de Berry é na verdade uma matriz unitária que leva um estado fundamental a outro. Veremos mais sobre fases de Berry não-Abelianas quando estudarmos o FQHE.

2.4 O Efeito Hall Quântico Inteiro: Teoria

Agora estamos em posição de explicar o efeito Hall quântico, começando pelo IQHE. No IQHE, temos elétrons bidimensionais se movendo na presença de um campo magnético intenso à baixas temperaturas. A menos do princípio da exclusão de Pauli, vamos ignorar as interações entre elétrons na configuração do IQHE, de modo que tudo o que estudamos na seção 2.3 seja aplicável.

Na seção 2.3, vimos que um elétron bidimensional de massa m e carga e, que se move na presença de um campo magnético, tem seus níveis de energia quantizados nos chamados níveis de Landau, e que cada nível de Landau é extremamente degenerado. O momento canônico \boldsymbol{p} de tal partícula é dado por

$$\boldsymbol{p} = m\dot{\boldsymbol{x}} - e\boldsymbol{A},$$

o que significa que sua velocidade é dada por

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{m}(\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}).$$

A corrente elétrica carregada por um elétron é $\boldsymbol{I}=-e\dot{\boldsymbol{x}}$. Considere que temos ν níveis de Landau ocupados. Cada nível abriga $N=AB/\Phi_0$ estados de elétrons. Somando as correntes geradas por cada elétron, temos uma corrente total de

$$oldsymbol{I} = -rac{e}{m} \sum_{ ext{estados ocupados}} ra{\psi} \left(oldsymbol{p} + e oldsymbol{A}
ight) \ket{\psi}$$

$$=-\frac{e}{m}\sum_{n=0}^{\nu}\sum_{k}\left\langle \psi_{n,k}\right|\left(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A}\right)\left|\psi_{n,k}\right\rangle.$$

No gauge de Landau, $\mathbf{A} = xB\hat{y}$. A corrente na direção \hat{x} é

$$I_{x} = -\frac{e}{m} \sum_{n=0}^{\nu} \sum_{k} \langle \psi_{n,k} | \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) | \psi_{n,k} \rangle.$$

Da (2.3.8), temos que

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi_{n,k}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/2} L_y}} e^{ik_y y} e^{-\frac{1}{2l_B^2}(x - x_0(k_y))^2} \left[H_n' - H_n \frac{x - x_0(k_y)}{l_B^2} \right].$$

Como, da relação de recorrência do polinômio de Hermite,

$$H_n'\left(\frac{x-x_0(k_y)}{l_B}\right) = \frac{1}{l_B}\left[H_{n+1}\left(\frac{x-x_0(k_y)}{l_B}\right) + \left(\frac{x-x_0(k_y)}{l_B}\right)H_n\left(\frac{x-x_0(k_y)}{l_B}\right)\right],$$

temos que

$$H'_n - H_n \frac{x - x_0(k_y)}{l_B^2} = \frac{1}{l_B} H_{n+1} + \frac{x - x_0(k_y)}{l_B^2} H_n - H_n \frac{x - x_0(k_y)}{l_B^2} = \frac{1}{l_B} H_{n+1},$$

ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi_{n,k}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/2} L_n}} e^{ik_y y} e^{-\frac{1}{2l_B^2} (x - x_0(k_y))^2} \frac{1}{l_B} H_{n+1} = \frac{1}{l_B} \psi_{n+1,k}.$$

Assim,

$$\langle \psi_{n,k} | \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) | \psi_{n,k} \rangle = -\frac{i\hbar}{l_B} \langle \psi_{n,k} | \psi_{n+1,k} \rangle = 0.$$

Ou seja, a corrente na direção \hat{x} se anula.

Agora, a corrente na direção \hat{y} é dada por

$$I_{y} = -\frac{e}{m} \sum_{n=0}^{\nu} \sum_{k} \langle \psi_{n,k} | \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + eBx \right) | \psi_{n,k} \rangle.$$

Da (2.3.8), segue imediatamente que

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \psi_{n,k} = \hbar k_y \psi_{n,k}.$$

Agora,

$$\langle \psi_{n,k} | x | \psi_{n,k} \rangle = \int d^{2} \mathbf{r} d^{2} \mathbf{r}' \langle \psi_{n,k} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | x | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \psi_{n,k} \rangle$$

$$= \int dx dy \psi_{n,k}(x,y) x \psi_{n,k}^{*}(x,y)$$

$$= \frac{1}{2^{n} n! \sqrt{\pi}} \int dx H_{n} \left(\frac{x - x_{0}}{l_{B}} \right) x H_{n} \left(\frac{x - x_{0}}{l_{B}} \right) e^{-\frac{(x - x_{0})^{2}}{l_{B}^{2}}}.$$

Seja $u = (x - x_0)/l_B$. Segue que

$$\langle \psi_{n,k} | x | \psi_{n,k} \rangle = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} l_B \int du H_n(u) (x_0 + l_B u) H_n(u) e^{-u^2}.$$

Como

$$\int du H_n(u) H_n(u) e^{-u^2} = 2^n n! \sqrt{\pi}$$

е

$$\int du H_n(u) u H_n(u) e^{-u^2} = \frac{1}{2} \int du H_n(u) \left(H_{n+1}(u) + H'_n(u) \right) e^{-u^2} = 0,$$

onde utilizamos as relações de ortogonalidade dos polinômios de Hermite, temos que

$$\langle \psi_{n,k} | x | \psi_{n,k} \rangle = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} l_B x_0 2^n n! \sqrt{\pi} = l_B x_0.$$

Daí,

$$I_{y} = -\frac{e}{m} \sum_{n=0}^{\nu} \sum_{k} \left(\hbar k_{y} + eBl_{B}x_{0} \right)$$

$$= -\frac{e}{m} \sum_{n=0}^{\nu} \sum_{k} \left(\hbar k_{y} - eBl_{B} \left(k_{y} l_{B}^{2} + \frac{E}{B\omega_{B}} \right) \right)$$

$$= -\frac{e}{m} \sum_{n=0}^{\nu} \sum_{k} \left(\hbar k_{y} - eBl_{B} \left(\frac{\hbar k_{y}}{eB} + \frac{mE}{eB^{2}} \right) \right)$$

$$= -\frac{e}{m} \nu \sum_{k} \left(\hbar k_{y} \left(1 - l_{B} \right) - l_{B} \frac{mE}{B} \right).$$

Por conveniência, vamos considerar que medimos distâncias em unidades de l_B . Isto equivale a tomar $l_B=1$, o que, por sua vez, equivale a medir fluxos magnéticos em múltiplos de $\Phi_0=h/e$. Temos então que

$$I_y = \frac{e}{m}\nu m \frac{E}{B} \sum_k = e\nu \frac{E}{B} N = e\nu \frac{E}{B} \frac{AB}{\Phi_0} = e\nu \frac{AE}{\Phi_0}.$$

Dividindo os dois lados pela área A, com $J_y = I_y/A$ sendo a densidade de corrente, temos que

$$J_y = \frac{e^2 \nu}{2\pi \hbar} E.$$

Da lei de Ohm $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$, como $\mathbf{E} = E\hat{x}$, segue que

$$\sigma_{xx} = 0, \ \sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi\hbar}\nu, \tag{2.4.1}$$

o que implica que

$$\rho_{xx} = 0, \ \rho_{xy} = -\frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{\nu}, \tag{2.4.2}$$

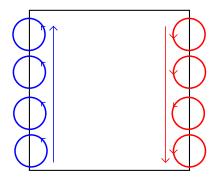


Figura 15: Representação semi-clássica do movimento quiral dos estados de borda.

exatamente como visto no experimento (a menos de um sinal que depende do sentido do campo magnético).

Então, não há mais nada no IQHE além da mecânica quântica de cargas em duas dimensões na presença de campos magnéticos? Utilizando a teoria dos níveis de Landau, calculamos que, se todos os níveis de Landau $0, 1, ..., \nu$ estão completamente preenchidos, a condutividade de Hall é quantizada enquanto que a condutividade transversal é nula. No entanto, a um campo B, em um nível de Landau existem $N = AB/\Phi_0$ estados possíveis. Isso significa que precisamos aplicar um campo $B = N\Phi_0/A$ para preencher um nível de Landau. Fixando a densidade de elétrons n, e notando que N é o número de elétrons por nível de Landau ν , temos que aplicar um campo $B = n\Phi_0/\nu$ para preencher o nível ν . Desse modo, deveríamos ter uma condutividade de Hall quantizada apenas quando $B = n\Phi_0/\nu$, mas observamos que a condutividade permanece quantizada em um plateau por um intervalo considerável de valores de campos magnéticos. Os plateaux não podem ser explicados apenas pela teoria dos níveis de Landau. Antes de explicar o mecanismo da formação dos *plateaux*, vamos comentar uma curiosa propriedade do IQHE, que é a presença de estados de borda quirais.

Estados de borda quirais. Considere um elétron bidimensional clássico se movendo na presença de um campo magnético perpendicular ao plano do movimento. A partícula descreve órbitas em, digamos, um sentido antihorário. Na fronteira do sistema, se o elétron não possuir energia suficiente para sair do material, ele deve colidir com a fronteira e voltar a se mover numa órbita anti-horária, o que resulta em uma corrente persistente que segue em uma direção apenas, chamada de corrente quiral, como mostrado na figura 15.

Os estados na borda da amostra no IQHE formam correntes quirais. Intuitivamente, é possível ver isso considerando que a amostra é infinitamente

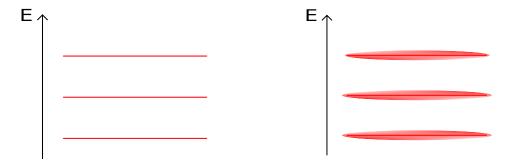


Figura 16: Níveis de energia na ausência de desordem.

Figura 17: Níveis de energia na presença de desordem.

longa na direção \hat{y} , enquanto que sua fronteira na direção \hat{x} é modelada por um potencial V(x), suave no interior e que cresce rapidamente quando x se aproxima de pontos na borda. No gauge de Landau, a Hamiltoniana do sistema é dada por

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + (p_y + eBx)^2) + V(x).$$

Na ausência de V, a função de onda se estende por um raio l_B . Ao redor de um ponto X dentro do disco de raio l_B , podemos expandir o potencial $V(x) \approx V(X) + (x-X)\partial_x V$, onde desprezamos termos de segunda ordem. Temos então um potencial linear em x, como quando introduzimos um campo elétrico. O resultado é que existe uma velocidade de grupo $v_y \propto -\partial_x V$, que é positiva ou negativa a depender de qual lado da borda da amostra estamos.

Correntes quirais são bastante robustas. Se adicionarmos impurezas no sistema, os elétrons do interior do material serão espalhados em direções aleatórias. Espalhar um elétron da fronteira em uma direção aleatória, no entanto, requer bastante energia. Como os elétrons de um lado da fronteira se movem apenas em um sentido, enquanto os elétrons do lado oposto se movem no sentido contrário, mudar a direção do movimento do elétron significa, efetivamente, levá-lo de um lado da fronteira ao lado oposto, o que, para sistemas grandes, requer bastante energia. Isso significa que as correntes quirais na fronteira do IQHE são imunes ao efeito de impurezas.

Desordem. Vamos explicar o mecanismo de formação dos plateaux. Tipicamente os materiais apresentam impurezas, que agem como um potencial aleatório, introduzindo desordem no sistema. No IQHE observado no Si-MOSFET, as impurezas são os íons negativos de boro que permanecem na camada de inversão, espalhando os elétrons livres aleatoriamente. A ação de tais íons pode ser modelada pela introdução de um potencial V(x,y) na Hamiltoniana do sistema.

Normalmente, quando introduzimos um potencial no sistema que não respeita simetrias, como o potencial aleatório V, temos uma quebra da degenerescência. Isto é, estados que antes possuíam a mesma energia agora possuem energias diferentes. No nosso caso, podemos interpretar o efeito da adição de V como um alargamento dos níveis de Landau, como mostrado nas figuras 16 e 17. Assumimos que a energia associada a V seja muito menor que o $gap \hbar \omega_B$ entre dois níveis de Landau, que modo que os níveis estendidos não se cruzem. Ou seja, não podemos ter muitos íons de boro no sistema, apenas uma pequena quantidade. Mais ainda, assumimos que o potencial não varie significativamente em um disco de raio l_B , i.e., $|\nabla V| << \hbar \omega_B/l_B$, de modo que possamos considerar que os estados sentem um potencial praticamente constante.

Dito isso, considere um estado de elétron. Vimos que, em uma visão semi-clássica, o centro da órbita do elétron é dado pelo ponto (x_0, y_0) , tal que

$$x_0 = x - \frac{1}{m\omega_B} \pi_y, \ y_0 = y + \frac{1}{m\omega_B} \pi_x,$$

onde $\pi = (\pi_x, \pi_y)$ é o momento mecânico. A velocidade do centro da órbita é dada pela equação de Heisenberg

$$i\hbar \dot{x}_0 = [x_0, H + V], i\hbar \dot{y}_0 = [y_0, H + V].$$

Como mostrado anteriormente, $[(x_0, y_0), H] = 0$. Segue que

$$i\hbar \dot{x}_0 = [x_0, V], i\hbar \dot{y}_0 = [y_0, V].$$

Expandindo o potencial em torno de (x_0, y_0) ,

$$V(x,y) \approx V(x_0, y_0) + (x - x_0) \frac{\partial V}{\partial x} \Big|_{x=x_0} + (y - y_0) \frac{\partial V}{\partial y} \Big|_{y=y_0},$$

onde desprezamos termos de segunda ordem pois o potencial não varia muito de (x, y) para (x_0, y_0) se (x, y) está em um disco de raio l_B . Os operadores $V(x_0, y_0), \frac{\partial V}{\partial y}\Big|_{y=y_0}$ e $\frac{\partial V}{\partial x}\Big|_{x=x_0}$ são múltiplos escalares da identidade e portanto comutam com (x_0, y_0) . Os operadores x e y também comutam com (x_0, y_0) (intuitivamente, eles medem pontos distintos de (x_0, y_0)). Segue que

$$i\hbar\dot{x}_0 = [x_0, y_0] \frac{\partial V}{\partial y} \Big|_{y=y_0},$$

$$i\hbar \dot{y}_0 = [y_0, x_0] \frac{\partial V}{\partial x} \Big|_{x=x_0}.$$

Como $[x_0, y_0] = il_B^2$, temos que

$$\dot{x}_0 = \frac{1}{eB} \frac{\partial V}{\partial u} \Big|_{u=u_0},\tag{2.4.3}$$

$$\dot{x}_0 = \frac{1}{eB} \frac{\partial V}{\partial y} \Big|_{y=y_0},$$

$$\dot{y}_0 = -\frac{1}{eB} \frac{\partial V}{\partial x} \Big|_{x=x_0}.$$
(2.4.3)

Daí, $(x_0, y_0) \cdot \nabla V = 0$, e o centro da órbita do elétron se move ao longo de equipotenciais. Em um mínimo ou máximo do potencial, $\nabla V = 0$, o que significa que $(\dot{x}_0, \dot{y}_0) = 0$. Ou seja, se (x_0, y_0) é um ponto de extremo do potencial aleatório, as coordenadas do centro da órbita permanecem fixas nesse ponto. O potencial aleatório tem como efeito localizar certos estados em seus pontos de extremo. Em um nível de Landau alargado, os estados que correspondem aos extremos da banda são localizados, enquanto que os estados no centro da banda são estendidos.

Voltando à condutividade, apenas estados que se estendem de um extremo da amostra a outro podem contribuir para a corrente de carga. Estados localizados são, em um certo sentido, imóveis, e não contribuem para o transporte de cargas. Assim, considere que preenchemos todos os estados estendidos em um dado nível de Landau. Variando B, preenchemos as vagas restantes com estados localizados, que não contribuem para a condutividade. Deste modo, a condutividade permanece em um plateau constante enquanto variamos B. A presença de impurezas então explica o aparecimento de plateaux no IQHE.

Entretanto, no cálculo da condutividade (2.4.1), consideramos que todos os estados contribuem igualmente para o transporte de cargas. Isto é, na soma, consideramos tanto estados localizados quanto estados estendidos. Como estados localizados não transportam cargas, os estados estendidos devem, de alguma forma, carregar ainda mais cargas para que o resultado da quantização da condutividade (2.4.1) se mantenha. A seguir, veremos que isso de fato acontece.

IQHE no anel de Corbino. Vamos considerar que a amostra na qual mediremos o IQHE é um anel. Supomos que, se a condutividade de Hall é de fato quantizada, o efeito não depende da geometria da amostra. Temos então elétrons bidimensionais se movendo em um anel, sob ação de um campo magnético perpendicular e à temperatura zero. Introduzimos um solenoide longo no centro do anel, como na figura 18, com um campo magnético nãonulo em seu interior. Assim, temos um fluxo magnético Φ no centro do anel. Os elétrons no anel não sentem o campo magnético do solenoide. Existe, no entanto, um potencial vetor diferente de zero na região do anel.

Suponha que, em t=0, temos um fluxo $\Phi=0$. Vamos ligar o fluxo lentamente, de modo que $\Phi = \Phi_0$ em t = T, onde $T >> 1/\omega_B$. Fazendo isso,

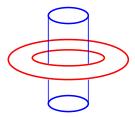


Figura 18: Anel de Corbino.

geramos uma força eletromotriz

$$\varepsilon = -\frac{d\Phi}{dt} = -\frac{\Phi_0}{T}.$$

Suponha que, devido à essa força, n elétrons são movidos da circunferência interior para a circunferência exterior do anel, gerando uma corrente radial I=-ne/T. Segue que

$$\rho_{xy} = \frac{\varepsilon}{I} = \frac{\Phi_0}{ne} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{n}.$$
 (2.4.5)

Ou seja, se os elétrons são transferidos de uma circunferência à outra, a resistividade de Hall é quantizada. Para ver que de fato isso acontece, vamos utilizar relembrar que a função de onda de um elétron no nível de Landau mais baixo é dada pela (2.3.25), isto é,

$$\psi_{LLL,k}(z,\bar{z}) = \frac{1}{2\pi l_B^2} \left(\frac{i}{\sqrt{2}}\right)^k \left(\frac{z}{l_B}\right)^k e^{-\frac{1}{4l_B^2}|z|^2}.$$

Fazendo $z=re^{i\phi},$ os extremos radiais da função de onda são dados pela equação

$$\frac{\partial \psi_{LLL,k}}{\partial r} = 0 \Leftrightarrow k - \frac{r^2}{2l_B^2} = 0,$$

cujas soluções são $r=\pm\sqrt{2kl_B^2}$. Segue que o raio no qual a função de onda assume seu valor máximo é $r=\sqrt{2kl_B^2}$. Como vimos anteriormente, quando variamos Φ de zero a $\Phi=\Phi_0$, acontece um fluxo espectral, e a função de onda $\psi_{LLL,k}$ para $\Phi=\Phi_0$ é igual a $\psi_{LLL,k+1}$ em $\Phi=0$. Ou seja, o efeito da variação de Φ é mover o estado de k para k+1, o que significa que o máximo da função de onda é movido de um raio $r=\sqrt{2kl_B^2}$ para $r=\sqrt{2(k+1)l_B^2}$. Então, de fato os elétrons se movem do círculo interior para o círculo exterior.

Agora, vamos considerar o efeito da desordem. Realizamos uma variação adiabática $\Phi=0 \to \Phi=\Phi'$, onde Φ' é um fluxo arbitrário. Vamos tentar anular seu efeito por uma transformação de gauge nas funções de onda,

$$\psi(r,\phi) \to \psi'(r,\phi) = e^{-\frac{ie\Phi'\phi}{2\pi\hbar}}\psi(r,\phi).$$

Note que, para os estados localizados, não há problema em fazer isso. Agora, considere um estado que cobre toda uma circunferência do anel. Para que a função de onda seja bem definida, devemos ter que $\psi(r,\phi) = \psi(r,\phi+2\pi)$. Isso impõe o seguinte vínculo nos parâmetros da transformação de gauge:

$$e^{-\frac{ie\Phi'\phi}{2\pi\hbar}} = e^{-\frac{ie\Phi'(\phi+2\pi)}{2\pi\hbar}},$$

o que significa que

$$e^{-\frac{ie\Phi'\phi}{2\pi\hbar}} = 1.$$

Logo, para que a função de onda de um estado estendido seja bem definida, devemos ter que $\Phi' = n\Phi_0$, $n \in \mathbb{Z}$. Assim, quando variamos o fluxo magnético adiabaticamente por um múltiplo de Φ_0 , os estados localizados não são afetados, mas os estados estendidos sofrem fluxo espectral, gerando uma corrente radial no anel. Temos então que de fato apenas os estados estendidos transportam cargas e são responsáveis pela condutividade quantizada do IQHE.

Mas onde entra a topologia? Vimos que a quantização da condutividade de Hall pode ser explicada pela dinâmica dos elétrons sob um campo magnético. Também vimos que os plateaux podem ser entendidos como efeitos resultantes das impurezas que existem no sistema. No entanto, ainda não vimos explicitamente o papel da topologia do sistema no IQHE. Vamos resolver isso agora.

Considere a configuração do IQHE em um toro T^2 . Isto é, pegamos o plano bidimensional de dimensões $L_x \times L_y$ no qual os elétrons se movem e identificamos todos os pontos (x,y) com os pontos $(x+L_x,y+L_y)$. Fazendo isso de forma adiabática, esperamos que as propriedades do sistema, entre elas a condutividade de Hall, não mudem. Temos um campo magnético uniforme \boldsymbol{B} normal à superfície do toro e um campo elétrico uniforme \boldsymbol{E} na direção \hat{x} . No gauge de Landau, o campo \boldsymbol{B} é determinado pelo potencial vetor $\boldsymbol{A} = xB\hat{y}$.

Introduzimos dois solenóides no toro, como na figura 19. Dentro deles, há um campo magnético não-nulo, o que significa que podemos considerar os solenóides como fontes de fluxos magnéticos Φ_x e Φ_y , perpendiculares aos dois ciclos não-contráteis do toro. Os fluxos magnéticos alteram o potencial vetor na superfície de T^2 , que agora possui como componentes $A_x = \Phi_x/L_x$ e $A_y = \Phi_y/L_y + xB$. Mais ainda, essa adição de fluxos gera uma perturbação na Hamiltoniana, dada por

$$\Delta H = -\boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{A}.$$

Podemos utilizar teoria de perturbação para analisar como a adição dos fluxos altera os estados do sistema. Suponha que, antes da introdução dos fluxos, o

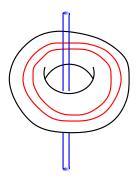


Figura 19: Consideramos o IQHE em um toro com fluxos magnéticos perpendiculares a cada ciclo não-contrátil.

sistema estava em um estado fundamental $|\psi_0\rangle$ (que é não-degenerado, pois o campo elétrico é não-nulo), de energia E_0 . Após a adição da perturbação, o estado do sistema é dado, em primeira ordem, por

$$|\psi_0\rangle' = |\psi_0\rangle + \sum_{n\neq 0} \frac{\langle n|\Delta H |\psi_0\rangle}{E_n - E_0} |n\rangle$$
$$= |\psi_0\rangle - \frac{\Phi_x}{L_x} \sum_{n\neq 0} \frac{\langle n|J_x |\psi_0\rangle}{E_n - E_0} |n\rangle - \frac{\Phi_y}{L_y} \sum_{n\neq 0} \frac{\langle n|J_y |\psi_0\rangle}{E_n - E_0} |n\rangle.$$

Considerando que

$$|\psi_0\rangle' - |\psi_0\rangle \approx |\frac{\partial \psi_0}{\partial \Phi_x}\rangle \Phi_x + |\frac{\partial \psi_0}{\partial \Phi_y}\rangle \Phi_y,$$

temos que

$$\left| \frac{\partial \psi_0}{\partial \Phi_i} \right\rangle \approx -\frac{1}{L_i} \sum_{n \neq 0} \frac{\langle n | J_i | \psi_0 \rangle}{E_n - E_0} | n \rangle ,$$

para i = x, y.

Note que, para i, j = x, y,

$$\langle \frac{\partial \psi_0}{\partial \Phi_i} | \frac{\partial \psi_0}{\partial \Phi_j} \rangle = \frac{1}{L_i L_j} \sum_{n \neq 0} \frac{\langle \psi_0 | J_i | n \rangle \langle n | J_j | \psi_0 \rangle}{(E_n - E_0)^2}.$$

Ou seja,

$$\begin{split} \langle \frac{\partial \psi_0}{\partial \Phi_y} | \frac{\partial \psi_0}{\partial \Phi_x} \rangle - \langle \frac{\partial \psi_0}{\partial \Phi_x} | \frac{\partial \psi_0}{\partial \Phi_y} \rangle &= \sum_{n \neq 0} \frac{\langle \psi_0 | I_y | n \rangle \, \langle n | I_x | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | I_x | n \rangle \, \langle n | I_y | \psi_0 \rangle}{(E_n - E_0)^2} \\ &= \frac{\sigma_{xy}}{i\hbar}, \end{split}$$

onde utilizamos a fórmula de Kubo (E.5). Logo,

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

$$= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \Phi_y} \langle \psi_0 | \frac{\partial}{\partial \Phi_x} | \psi_0 \rangle - \frac{\partial}{\partial \Phi_x} \langle \psi_0 | \frac{\partial}{\partial \Phi_y} | \psi_0 \rangle \right). \tag{2.4.6}$$

Vamos utilizar esta fórmula da condutividade de Hall para explicar como a topologia do sistema influencia no IQHE.

Com os campos elétrico e magnético fixos, os únicos parâmetros da Hamiltoniana que podemos ajustar são os fluxos Φ_x , Φ_y . Consideramos então a Hamiltoniana como uma função $H=H(\Phi)$, onde $\Phi=(\Phi_x,\Phi_y)$, que assume valores em um espaço de parâmetros bidimensional. Lembrando da nossa discussão sobre fluxo espectral, o espectro de energias do sistema é invariante sob a transformação $(\Phi_x,\Phi_y) \to (\Phi_x+\Phi_0,\Phi_y+\Phi_0)$. Isto é, a Hamiltoniana no ponto (Φ_x,Φ_y) é igual à Hamiltoniana em $(\Phi_x+\Phi_0,\Phi_y+\Phi_0)$. Sendo assim, para evitar redundâncias, consideramos um espaço de parâmetros períodico, de período Φ_0 em ambas as direções. Isso equivale a considerar que Φ assume valores em um toro bidimensional T_{Φ}^2 .

Assim, suponha que, com o sistema no estado fundamental $|\psi_0\rangle$, variamos o fluxo Φ de modo que este percorre uma trajetória fechada ao longo de um ciclo não-contrátil na superfície do toro T_{Φ}^2 . Por exemplo, variamos o fluxo de $\Phi = 0$ em t = 0 até $\Phi = (\Phi_0, \Phi_0)$ em um certo tempo t = t'. A Hamiltoniana não muda, e o espectro do sistema flui de modo que $n \to n+1$. Ao fim do ciclo, o estado fundamental adquire uma fase de Berry, determinada pela conexão de Berry

$$A_i = -i \left\langle \psi_0 \right| \frac{\partial}{\partial \Phi_i} \left| \psi_0 \right\rangle,$$

para i = x, y. Introduzindo variáveis adimensionais $\theta_i \in [0, 2\pi)$ tais que

$$\theta_i = \frac{\Phi_0}{2\pi} \Phi_i,$$

para i = x, y, temos que

$$A_i = -i\frac{2\pi}{\Phi_0} \langle \psi_0 | \frac{\partial}{\partial \theta_i} | \psi_0 \rangle.$$

A curvatura dessa conexão é dada por

$$F_{xy} = \left(\frac{2\pi}{\Phi_0}\right) \left(\frac{\partial A_x}{\partial \theta_y} - \frac{\partial A_y}{\partial \theta_x}\right)$$

$$=-i\left(\frac{2\pi}{\Phi_0}\right)^2\left(\frac{\partial}{\partial\theta_y}\left\langle\psi_0\right|\frac{\partial}{\partial\theta_x}\left|\psi_0\right\rangle-\frac{\partial}{\partial\theta_x}\left\langle\psi_0\right|\frac{\partial}{\partial\theta_y}\left|\psi_0\right\rangle\right).$$

Comparando com a (2.4.6), vemos que

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar} F_{xy}.$$

Se tomarmos a média sobre todos os fluxos possíveis, temos que

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{2\pi\hbar}C,\tag{2.4.7}$$

onde

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{T_0^2} d^2\theta F_{xy} \tag{2.4.8}$$

é o primeiro número de Chern, um invariante topológico que é sempre um número inteiro. Ou seja, a quantização da condutividade de Hall é uma consequência da topologia não-trivial das bandas de energia do sistema, i.e., do espaço de parâmetros T_{Φ}^2 .

Invariante de TKNN. A quantização da condutividade de Hall em termos do invariante de Chern é bem mais geral do que o que foi apresentado até agora. Para ver isso, considere um sistema de elétrons não-interagentes em uma rede bidimensional. Os pontos da rede estão separados por uma distância de a na direção \hat{x} e de b na direção \hat{y} . Em tais condições, sabemos que o sistema forma bandas de energia. Cada banda é parametrizada por um vetor de onda $\mathbf{k} = (k^x, k^y)$, que assume valores na zona de Brillouin

$$-\frac{\pi}{a} < k^x \le \frac{\pi}{a}, \ -\frac{\pi}{b} < k^y \le \frac{\pi}{b}.$$

Estados com vetores de onda nas fronteiras da zona de Brillouin são identificados. Isso significa que os vetores de onda podem assumir valores em um toro T^2 , como quando consideramos fluxos no toro. Supomos também que existe um gap entre bandas de energia, e que a energia de Fermi se encontra em um desses gaps. Isso significa que o sistema que estamos estudando é um isolante.

Em uma banda de energia, podemos escrever a função de onda na forma de Bloch:

$$\psi(\boldsymbol{x}) = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}),$$

onde $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ é períodica na rede, i.e., $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$, onde $\mathbf{e} = (0, b)$ ou $\mathbf{e} = (a, 0)$. Em uma evolução adiabática que descreve um ciclo c no toro, o estado $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ adquire uma fase de Berry

$$\gamma = \oint_c A_i(\mathbf{k}) dk^i,$$

onde $A_i(\mathbf{k})$ é a conexão de Berry

$$A_i(\mathbf{k}) = -i \langle u_{\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k^i} | u_{\mathbf{k}} \rangle.$$

A curvatura de Berry associada à conexão é dada por

$$\begin{split} F_{xy}(\boldsymbol{k}) &= \frac{\partial A_x(\boldsymbol{k})}{\partial k^y} - \frac{\partial A_y(\boldsymbol{k})}{\partial k^x} \\ &= -i \frac{\partial}{\partial k^y} \left\langle u_{\boldsymbol{k}} \right| \frac{\partial}{\partial k^x} \left| u_{\boldsymbol{k}} \right\rangle + i \frac{\partial}{\partial k^x} \left\langle u_{\boldsymbol{k}} \right| \frac{\partial}{\partial k^y} \left| u_{\boldsymbol{k}} \right\rangle, \end{split}$$

e o invariante de Chern é definido como

$$C = -\frac{1}{2\pi} \int_{T^2} F_{xy}(\mathbf{k}) d^2 \mathbf{k}.$$

Vamos relacionar o invariante de Chern com a condutividade de Hall utilizando a fórmula de Kubo (E.5). A fórmula de Kubo nos diz que

$$\sigma_{xy} = i\hbar \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0|I_y|n\rangle \langle n|I_x|0\rangle - \langle 0|I_x|n\rangle \langle n|I_y|0\rangle}{(E_n - E_0)^2}.$$

No caso presente, o estado inicial $|0\rangle$ pode ser qualquer um dos estados das bandas que estão preenchidas, enquanto que o estado $|n\rangle$ pode ser qualquer estado das bandas vazias. Podemos escrever, então,

$$\sigma_{xy} = i\hbar \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | I_y | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\beta} | I_x | u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle - \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | I_x | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\beta} | I_y | u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle}{(E^{\beta}(\mathbf{k}) - E^{\alpha}(\mathbf{k}))^2},$$

onde consideramos que α é um índice que corre sobre as bandas ocupadas e β é um índice que corre sobre as bandas vazias. Note que deveríamos, na verdade, ter escrito duas integrais sobre os momentos, pois os números de onda de bandas diferentes não precisam ser iguais. No entanto, isso não vai influenciar nosso cálculo.

Antes de prosseguirmos, precisamos definir a corrente I de forma conveniente. Considere que a Hamiltoniana do sistema seja dada por H e que $\psi(x)$ seja tal que

$$H\psi(\boldsymbol{x}) = E(\boldsymbol{k})\psi(\boldsymbol{x}).$$

Utlizando a decomposição de Bloch, segue diretamente que

$$\tilde{H}(\mathbf{k})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = E(\mathbf{k})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}),$$

onde $\tilde{H}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}He^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$. Definimos a corrente \mathbf{I} como sendo a velocidade de grupo dos pacotes de onda,

$$\boldsymbol{I} = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \boldsymbol{k}} \Big|_{\boldsymbol{k} = 0}.$$

Tal definição de fato faz sentido, pois no caso de um elétron livre, $H={\bm p}^2/2m,$ $\tilde{H}=({\bm p}+\hbar{\bm k})^2/2m$ e

$$I = \frac{e}{\hbar} \left\lceil \frac{2(\boldsymbol{p} + \hbar \boldsymbol{k})\hbar}{2m} \right\rceil \bigg|_{\boldsymbol{k} = 0} = e \frac{\boldsymbol{p}}{m}.$$

Como $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ no regime semi-clássico, temos o resultado esperado. Utilizando a corrente definida acima na fórmula de Kubo, temos que

$$\sigma_{xy} = i \frac{e^2}{(2\pi)^2 \hbar} \int d^2 \mathbf{k} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \partial_y \tilde{H} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\beta} | \partial_x \tilde{H} | u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle - \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \partial_x \tilde{H} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\beta} | \partial_y \tilde{H} | u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle}{(E^{\beta}(\mathbf{k}) - E^{\alpha}(\mathbf{k}))^2},$$

onde $\partial_i \tilde{H} = \partial \tilde{H} / \partial k^i$. Como

$$\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \partial_{y} \tilde{H} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle = \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \left(\partial_{y} (\tilde{H} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle) - \tilde{H} \partial_{y} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle \right)$$

$$= \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \left(\partial_{y} E^{\beta} (\mathbf{k}) | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle + E^{\beta} (\mathbf{k}) \partial_{y} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle - \tilde{H} \partial_{y} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle \right)$$

$$= \partial_{y} E^{\beta} (\mathbf{k}) \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle + E^{\beta} (\mathbf{k}) \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \partial_{y} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle - \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \tilde{H} \partial_{y} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle$$

$$= \left(E^{\beta} (\mathbf{k}) - E^{\alpha} (\mathbf{k}) \right) \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \partial_{y} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle,$$

pois $|u_{\mathbf{k}}^{\alpha}\rangle$ e $|u_{\mathbf{k}}^{\beta}\rangle$ são ortogonais $(\alpha \in \beta)$ são bandas diferentes). Note que, como $\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha}|u_{\mathbf{k}}^{\beta}\rangle=0$,

$$\partial_y \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle = \partial_y (\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} |) | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle + \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \partial_y | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle = 0,$$

isto é,

$$\partial_y(\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha}|) | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle = -\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha}| \partial_y | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle,$$

ou seja,

$$\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \partial_{y} \tilde{H} | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle = - \left(E^{\beta}(\mathbf{k}) - E^{\alpha}(\mathbf{k}) \right) \partial_{y} (\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} |) | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle,$$

e o mesmo vale para derivadas com relação a k^x . Logo, temos que

$$\sigma_{xy} = i \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha,\beta} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{2\pi} \left[\partial_y (\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} |) | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\beta} | \partial_x | u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle - \partial_x (\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} |) | u_{\mathbf{k}}^{\beta} \rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\beta} | \partial_y | u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle \right].$$

Como $\sum_n |u^n_{\pmb k}\rangle \, \langle u^n_{\pmb k}| = 1,$ devemos ter que

$$\sum_{\beta} |u_{\mathbf{k}}^{\beta}\rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\beta}| = 1 - \sum_{\alpha} |u_{\mathbf{k}}^{\alpha}\rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha}|.$$

Introduzindo essa identidade na fórmula de Kubo, obtemos

$$\sigma_{xy} = i \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{2\pi} \left[\partial_y \left\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \right| \partial_x \left| u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \right\rangle - \partial_x \left\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \right| \partial_y \left| u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \right\rangle \right] + A, \qquad (2.4.9)$$

onde

$$A = i \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{2\pi} \sum_{\alpha',\alpha} \left[-\partial_y \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | | u_{\mathbf{k}}^{\alpha'} \rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha'} | \partial_x | u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle + \partial_x \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | | u_{\mathbf{k}}^{\alpha'} \rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha'} | \partial_y | u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle \right]$$

$$= i \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{2\pi} \sum_{\alpha',\alpha} \left[\langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \partial_y | u_{\mathbf{k}}^{\alpha'} \rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha'} | \partial_x | u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle - \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha} | \partial_x | u_{\mathbf{k}}^{\alpha'} \rangle \langle u_{\mathbf{k}}^{\alpha'} | \partial_y | u_{\mathbf{k}}^{\alpha} \rangle \right]$$

$$= 0$$

Logo, podemos imediatamente identificar o integrando com a curvatura da conexão de Berry, e temos que

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{2\pi} F_{xy}(\mathbf{k})$$
 (2.4.10)

$$= -\frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha} C_{\alpha}, \qquad (2.4.11)$$

onde C_{α} é o primeiro número de Chern correspondente à banda α . Neste contexto, C_{α} é chamado de invariante de TKNN, por causa de seus descobridores [16]. Sistemas como o que descrevemos aqui são normalmente chamados de isolantes topológicos.

Em resumo, vimos que a teoria por trás do efeito Hall quântico inteiro é basicamente a teoria dos níveis de Landau. A quantização da condutividade de Hall pode ser obtida calculando-se diretamente o valor esperado da corrente elétrica nos estados de Landau. Os *plateaux* podem ser entendidos através da presença de desordem no sistema. A presença de estados de borda quirais também é explicada pela teoria de Landau.

No entanto, se considerarmos que o sistema possui topologia não-trivial, conseguimos enxergar uma origem topológica para o fenômeno do IQHE. A quantização da condutividade de Hall e o aparecimento de *plateaux* podem ser explicados pelo *gedankenexperiment* de Laughlin. Mais ainda, a condutividade de Hall pode ser expressa em termos de um invariante topológico das bandas de energia do sistema, o invariante de Chern ou TKNN.

Mas como IQHE foge do paradigma de Landau, explicado em 1? Note que o IQHE ocorre sob um campo magnético muito intenso. O campo magnético quebra explicitamente uma simetria do sistema de partículas livres, a simetria por reversão temporal. Poderíamos pensar, então, que o IQHE é uma fase da matéria que ocorre quando a simetria por reversão temporal é quebrada, mas note que essa quebra de simetria é explícita, e não uma quebra espontânea do estado fundamental. Entretanto, mostramos um sistema sem a introdução de campos magnéticos onde a condutividade de Hall é dada pelo invariante TKNN. Isso significa que a quebra de simetria por inversão temporal não é necessária para termos um IQHE. De fato, isolantes topológicos não quebram a simetria de inversão temporal e apresentam uma espécie de IQHE, com uma condutividade de Hall topológica. Isolantes topológicos são exemplos de fases topológicas protegidas por simetrias, as quais iremos estudar mais adiante.

Temos então o seguinte cenário: existem fases quânticas da matéria, que ocorrem à baixas temperaturas, que não são caracterizadas por quebras de simetria, mas sim por certas quantidades, que podemos considerar como parâmetros de ordem, que são invariantes topológicos de algum espaço. Sendo topológicos, tais parâmetros de ordem são robustos, no sentido de que pequenas perturbações no sistema não podem mudá-los. Isto significa que as fases correspondentes são bastante estáveis. Apenas mudanças drásticas nos graus de liberdade do sistema causam transições de fase. O IQHE e isolantes topológicos nos fornecem nosso primeiro exemplo de fase topológica da matéria, que não pode ser descrita pela teoria de Landau.

2.5 O Efeito Hall Quântico Fracionário: Teoria

Nesta seção, vamos desenvolver uma teoria para explicar o FQHE. Assim como no IQHE, no FQHE temos elétrons bidimensionais se movendo na presença de um campo magnético intenso à baixas temperaturas. No entanto, no FQHE utilizam-se amostras com menos desordem que no IQHE, à temperaturas mais baixas e sob campos magnéticos muito mais intensos que no IQHE, gerando de fato um "limite quântico extremo". Como não temos nada além de elétrons na presença de campo magnético, esperamos que a teoria dos níveis de Landau ainda consiga capturar alguns aspectos do FQHE.

A principal diferença experimental entre o IQHE e o FQHE é o fato de que a condutividade de Hall no FQHE é um múltiplo fracionário de e^2/h . Como as amostras do FQHE são mais puras, o efeito dos potenciais aleatórios devem ser menores, o que deixa espaço para a interação de Coulomb entre elétrons ganhar relevância. Então, para tentar explicar o FQHE, vamos passar a considerar que a interação de Coulomb entre elétrons é relevante, e supomos

uma hierarquia de energias do tipo

$$\hbar\omega_B >> E_{\rm Coulomb} >> V_{\rm Desordem}$$
.

Tal hierarquia é razoável, visto que B>>1. Assim, podemos supor que os elétrons estão efetivamente em um estado fundamental do sistema, habitando o nível de Landau mais baixo (LLL). A presença de um potencial de Coulomb faz com que cada nível de Landau se alargue, mas não é forte o suficiente para superar o $gap \hbar \omega_B$ e causar uma mistura dos níveis. Se a presença do potencial de Coulomb fizer surgir um gap de energia em um nível de Landau, de modo que tenhamos uma fração ν do nível abaixo do gap ocupada por estados, podemos explicar o FQHE do mesmo modo que explicamos o IQHE. Fazendo os mesmos cálculos do valor esperado da corrente, como consideramos apenas os estados ocupados, teríamos uma condutividade de Hall igual a $\nu e^2/h$. Os plateaux poderiam ser explicados ainda pela presença de desordem, que localizam estados no gap, fazendo com que estes não contribuam para a condutividade.

O fato de termos interações de Coulomb gera um comportamento coletivo dos elétrons muito diferente do caso do IQHE. Para ver isso, vamos estudar a função de onda de muitos corpos do sistema. Como a adição do potencial de Coulomb torna a Hamiltoniana de difícil diagonalização, vamos utilizar um ansatz devido a Laughlin [17], que explica a física nas frações de ocupação

$$\nu = \frac{1}{m},$$

onde m é um inteiro ímpar. O estado de Laughlin que descreve o estado fundamental do sistema de N elétrons do FQHE na fração de ocupação $\nu=1/m$ é dado por

$$\psi(z_1, ..., z_N) = \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m e^{-\frac{1}{4l_B^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2}.$$
 (2.5.1)

Para entender como Laughlin chegou a essa função de onda, note que o FQHE é observado na presença de campos magnéticos muito intensos e à temperaturas muito baixas, o que sugere que os elétrons habitam o menor nível de Landau (LLL). Mais ainda, como $\omega_B = eB/m$, para B muito intenso temos que $\hbar\omega_B >> E_{Coulomb}$, o que indica que a interação elétron-elétron não é suficiente para fazer com que uma partícula mude de nível de Landau. Ou seja, os elétrons permanecem sempre no LLL. Como discutimos na seção 2.3, a função de onda de um elétron no LLL é dada por

$$\psi_{LLL}(z) = f(z)e^{-\frac{1}{4l_B^2}|z|^2},$$

onde f(z) é uma função analítica. Então, é razoável assumir que a função de onda do sistema de N elétrons no LLL pode ser escrita como

$$\psi(z_1,...,z_N) = f(z_1,...,z_N)e^{-\frac{1}{4l_B^2}\sum_{i=1}^N|z_i|^2}.$$

Devido ao princípio da exclusão, a função $f(z_1, ..., z_N)$ deve ser antissimétrica sob a troca $z_i \leftrightarrow z_j$. Assim, a proposta de Laughlin de que

$$f(z_1, ..., z_N) = \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m,$$

que é antissimétrica se m é ímpar, é razoável. Para ver que, neste estado, a fração de ocupação é de fato $\nu=1/m$, considere uma partícula na posição z_1 . Os termos que envolvem essa partícula na função de onda de muitos corpos são

$$\prod_{i=2}^{N} (z_1 - z_i)^m,$$

o que significa que temos m(N-1) potências de z_1 . Como vimos na seção 2.3, o expoente do polinômio na função de onda nos dá o momento angular da partícula, e neste caso z_1 possui momento angular $m(N-1) \approx mN$ para N >> 1. A partícula ocupa um raio igual a $\sqrt{2mNl_B^2}$, o que significa que ocupa uma área de $2\pi mNl_B^2$. O número de estados no nível de Landau completo é $AB/\Phi_0 = A/2\pi l_B^2 \approx mN$, o que significa que N elétrons ocupam apenas $\nu = \frac{1}{m}$ do nível, como esperado.

Outro teste para o estado de Laughlin pode ser elaborado considerando o caso onde todo o nível de Landau está completamente preenchido. Neste caso, temos $\nu=1$ e o estado do sistema, de acordo com Laughlin, seria

$$\psi(z_1,...,z_N) = \prod_{i < j} (z_i - z_j) e^{-\frac{1}{4l_B^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2}.$$

Mas, o caso onde todo o nível está preenchido corresponde ao caso onde não há interação elétron-elétron. Ou seja, a função de onda de muitos corpos pode ser obtida da função de onda de cada elétron utilizando um determinante de Slater. De fato, a função de um elétron em um estado i na posição j é dada por $\psi_i(z_j) = z_j^{i-1} e^{-\frac{1}{4l_B^2}|z_j|^2}$, para i,j=1,...,N. A função de onda do sistema é dada por

$$\psi(z_1, ..., z_N) = \det \begin{pmatrix} \psi_1(z_1) & \psi_1(z_2) & ... & \psi_1(z_N) \\ \psi_2(z_1) & \psi_2(z_2) & ... & \psi_2(z_N) \\ \vdots & & & \vdots \\ \psi_N(z_1) & \psi_N(z_2) & ... & \psi_N(z_N) \end{pmatrix}$$

$$= \det(z_i^{i-1}) e^{-\frac{1}{4l_B^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2}.$$

Como $\det(z_i^{i-1})$ é o determinante de Vandermonde,

$$\det(z_j^{i-1}) = \prod_{i < j} (z_i - z_j), \tag{2.5.2}$$

temos como resultado o estado de Laughlin.

Intuitivamente, o estado de Laughlin descreve um sistema de N partículas cujas funções de onda podem ser visualizadas como um "pico", de raio proporcional ao comprimento magnético l_B . Essas partículas se repelem, pois quando suas posições se aproximam, o estado de Laughlin tende a zero. No entanto, a exponencial $\exp\left[-\frac{1}{4l_B^2}\sum_{i=1}^N|z_i|^2\right]$ impede as partículas de se distanciarem muito da origem. Existe então um movimento bastante intrincado que os elétrons realizam nesse sistema.

 $Plasma\ de\ partículas.$ Note que, se quisermos saber o valor esperado de algum observável O(z)no estado de Laughlin, teremos que calcular a função de correlação

$$\langle O(z) \rangle = \frac{1}{\int \prod_{i=1}^{N} dz_i P(z_1, ..., z_N)} \int \prod_{i=1}^{N} dz_i O(z) P(z_1, ..., z_N),$$

onde

$$P(z_1,...,z_N) = |\psi(z_1,...,z_N)|^2 = \prod_{i < j} \frac{|z_i - z_j|^{2m}}{l_B^{2m}} e^{-\sum_{i=1}^N |z_i|^2/2l_B^2}.$$

Podemos fazer um paralelo com a física estatística se considerarmos $P(z_1, ..., z_N)$ como uma espécie de probabilidade de Gibbs. Definimos então a função $U = U(z_1, ..., z_N)$ tal que

$$P(z_1, ..., z_N) = e^{-\beta U(z_1, ..., z_N)}$$

Tomando o logaritmo dos dois lados, temos que

$$-\beta U(z_1, ..., z_N) = 2m \sum_{i \le j} \log \left(\frac{|z_i - z_j|}{l_B} \right) - \sum_{i=1}^N \frac{|z_i|^2}{2l_B^2}.$$

Para que $U(z_1, ..., z_N)$ se torne um objeto mais familiar, fixamos a "temperatura" $\beta = 2/m$. Segue que

$$U(z_1, ..., z_N) = -m^2 \sum_{i \le j} \log \left(\frac{|z_i - z_j|}{l_B} \right) + m \sum_{i=1}^N \frac{|z_i|^2}{4l_B^2}.$$

Ou seja, a densidade de probabilidade do estado de Laughlin equivale ao estado de Gibbs de um plasma de partículas de carga q=-m à uma temperatura de T=m/2 em duas dimensões. Para ver que $U(z_1,...,z_N)$ é a energia potencial elétrica de um plasma de partículas, note que o potencial elétrico entre duas partículas pontuais de carga q em duas dimensões é

$$\phi(\mathbf{r}) = -q \log \left(\frac{r}{l_B}\right),$$

que é basicamente o primeiro termo de U(z). O segundo termo descreve um fundo neutralizante de carga constante ρ_0 . Um fundo de carga constante gera um potencial $-\nabla^2\phi=2\pi\rho_0$. Como $-\nabla^2\left(|z|^2/4l_B^2\right)=-1/l_B^2$, temos que a densidade de carga do fundo é dada por

$$\rho_0 = -\frac{1}{2\pi l_B^2}.$$

Com isso, podemos prever a densidade média de elétrons. Como cada partícula tem carga -m, uma densidade média n de elétrons tal que $-mn = \rho_0$ é necessária para neutralizar a carga do fundo. Segue que

$$n = \frac{1}{2m\pi l_B^2},$$

ou seja, a densidade média é uniforme a uma fração $\nu = 1/m$.

Intuitivamente, para temperaturas pequenas (à densidade fixa), o plasma deveria se solidificar, enquanto para temperaturas altas, deveria se liquefazer. Do mesmo modo, à temperatura fixa, à baixas densidades, o plasma deveria se solidificar e à altas densidades, deveria se liquefazer. Estudos numéricos indicam que para as frações mais comumente observadas, m=3 e m=5, o estado de Laughlin descreve um líquido.

Quasi-partículas. O estado de Laughlin descreve apenas o estado fundamental do FQHE a $\nu=1/m$. Utilizando tal estado, no entanto, podemos construir estados excitados do sistema. O FQHE apresenta basicamente dois tipos de quasi-partículas: quasi-buracos e quasi-elétrons.

A função de onda de um quasi-buraco na posição w é dada por

$$\psi_{hole}(z_1, ..., z_N; w) = \prod_{i=1}^{N} (z_i - w) \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m e^{-\frac{1}{4l_B^2} \sum_{i=1}^{N} |z_i|^2}.$$
 (2.5.3)

De fato, a densidade de elétrons se aproxima de zero na vizinhança do ponto w, o que indica que há ali um buraco no mar de elétrons. De forma geral,

podemos introduzir M quasi-buracos nas posições $w_1, ..., w_M$, de modo que o estado dessa configuração de quasi-partículas seja dado por

$$\psi_{hole}(z;w) = \prod_{i=1}^{N} \prod_{j=1}^{M} (z_i - w_j) \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m e^{-\frac{1}{4l_B^2} \sum_{i=1}^{N} |z_i|^2}.$$
 (2.5.4)

Um quasi-buraco de fato se comporta como uma partícula, de carga $q_h=+e/m$ como veremos mais tarde. Que o quasi-buraco se comporta como uma partícula pontual é fácil de ver das funções de onda descritas acima. Conseguimos uma forma intuitiva de ver que o quasi-buraco possui carga +e/m se considerarmos a situação em que colocamos m quasi-buracos no mesmo ponto w. A função de onda é dada por

$$\psi_{hole}(z;w) = \prod_{i=1}^{N} (z_i - w)^m \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m e^{-\frac{1}{4l_B^2} \sum_{i=1}^{N} |z_i|^2}.$$

Note que o termo $\prod_{i=1}^N (z_i - w)^m$ poderia muito bem ser incorporado ao termo $\prod_{i < j} (z_i - z_j)^m$ se w representasse a coordenada de um elétron. Ou seja, recuperamos o estado fundamental de Laughlin com N+1 elétrons se considerarmos que m quasi-buracos no ponto w equivalem a um elétron na posição w. Como m quasi-buracos equivalem a um elétron, um quasi-buraco deve ter carga $|q_h| = |e|/m$. Como na posição do quasi-buraco não existem partículas de carga negativa (elétrons), sua carga deve ser positiva. Logo, $q_h = +e/m$. Um argumento mais preciso será dado mais adiante.

Existem também quasi-partículas com carga negativa no fluido de Hall, os chamados quasi-elétrons. A função de onda de um quasi-elétron na posição w é dada por

$$\psi_{eletron}(z_1, ..., z_N; w) = \left[\prod_{i=1}^{N} \left(2 \frac{\partial}{\partial z_i} - w \right) \prod_{k < l} (z_k - z_l)^m \right] e^{-\frac{1}{4l_B^2} \sum_{i=1}^{N} |z_i|^2}.$$
(2.5.5)

O quasi-elétron possui carga $q_e = -e/m$. Devido à complexidade de sua função de onda, vamos lidar mais com quasi-buracos, assumindo que tudo o que fizermos pode ser imediatamente aplicado para quasi-elétrons.

E importante ressaltar que, devido às fortes interações elétron-elétron e ao forte campo magnético, as excitações elementares do sistema deixam de ser partículas usuais como elétrons e passam a ser quasi-partículas, que podem ser vistas como excitações coletivas, como se vários elétrons se combinassem para efetivamente se comportarem como uma única partícula de carga -e/m.

Esse fenômeno emergente de formação de excitações coletivas é característico de sistemas fortemente correlacionados.

Os quasi-buracos são importantes para a condutividade de Hall. Vamos relembrar a configuração do efeito Hall no anel de Corbino. Temos um fluxo magnético no centro, que variamos de 0 a Φ_0 em um certo tempo t. Essa variação causa um fluxo espectral no estado do sistema, tal que, se no tempo t=0 o estado possuía momento angular m com $\Phi=0$, no tempo t o estado possui momento angular m+1 com $\Phi=\Phi_0$. O aumento do momento angular equivale à introdução de um fator $\prod_{i=1}^N z_i$ no estado de Laughlin. Como nada depende do raio do círculo interior do anel e nem do raio do solenóide em seu centro, diminuindo ambos arbitrariamente, ainda teremos o mesmo efeito. Logo, no limite onde ambos os raios tendem a zero, essa variação do fluxo magnético tem o mesmo efeito que a introdução de um quasi-buraco na posição w=0. Assim, considerando que o estado do sistema descreve um quasi-buraco, variando Φ de 0 a Φ_0 , o quasi-buraco é transferido do centro para a borda do anel, o que significa que uma carga +e/m é transferida do centro para a borda. Para transferir um elétron, então, devemos fazer esse processo m vezes, i.e., variar Φ de 0 a $m\Phi_0$. Segue que a condutividade de Hall resultante é dada por

$$\sigma_{xy} = \frac{e}{\Phi_0} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \frac{1}{m},$$

como esperado. Este resultado nos leva a crer que são os quasi-buracos que carregam a corrente no FQHE. De fato, isto foi observado experimentalmente. Por exemplo, a corrente no FQHE a $\nu=1/3$ é carregada por partículas de carga e/3, como observado em [18].

Anyons. Além de carga fracionária, as quasi-partículas do FQHE também possuem estatística fracionária e se comportam como anyons sob troca. Por estatística fracionária, queremos dizer que quando trocamos duas quasi-partículas indênticas, a função de onda do sistema adquire uma fase arbitrária $e^{i\pi\alpha}$. Isto é possível graças ao fato de que no FQHE, as quasi-partículas vivem em 2+1 dimensões.

Em 3D, as partículas podem ser apenas bósons ou férmions. Para ver isso, considere duas partículas idênticas nas posições \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 . A função de onda do sistema é $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Como as partículas são idinstiguíveis, se trocarmos a posição das duas a amplitude de probabilidade deve permanecer a mesma, i.e., $|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 = |\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)|^2$, o que significa que as duas funções de onda podem diferir apenas por uma fase:

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=e^{i\pi\alpha}\psi(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1).$$

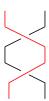


Figura 20: Caminho descrito por duas partículas quando trocamos suas posições duas vezes. Em 3D, esse caminho é equivalente ao caminho trivial em linha reta. Em 2D não conseguimos deformar esse caminho sem que as duas trajetórias se interceptem em algum ponto.

Realizando outra troca de posições, o sistema volta ao estado inicial, e devemos ter que

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{2\pi i \alpha} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

o que implica que $\alpha = 0$ ou $\alpha = 1$. Se $\alpha = 0$,

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1)$$

e as duas partículas são bósons. Se $\alpha = 1$,

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = -\psi(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)$$

e as duas partículas são férmions.

Podemos enxergar a troca dupla de posições como um caminho no espaçotempo, como na figura 20. Em 3D, tal caminho pode ser continuamente deformado no caminho onde as duas partículas permanecem paradas no mesmo ponto. Por causa disso, podemos dizer que o estado final é igual ao estado inicial. Em 2D no entanto, o caminho não pode ser deformado continuamente no caminho trivial. A função de onda deve reter informações sobre o caminho pelo qual as partículas passaram na forma da fase $e^{i\pi\alpha}$. Ou seja, em 2D, depois de uma troca de partículas,

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\pi\alpha} \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1),$$

onde α é qualquer fase, e segue que partículas em 2D podem apresentar qualquer estatística intermediária entre bósons e férmions. Daí o nome anyons.

Em outras palavras, em 3D a troca de partículas se dá aplicando-se um operador unitário obtido de uma representação do grupo de permutações. Já em 2D, o grupo relevante é o chamado grupo de braid. Suponha que temos n partículas dispostas ao longo de uma linha reta. Trocando suas posições, temos um emaranhado de trajetórias que formam um braid, como na figura 21. Braids são equivalentes se puderem ser transformados continuamente uns

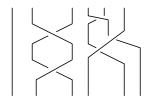


Figura 21: Um possível braid de 6 partículas.

nos outros. Todos os possíveis braids de um número n de partículas formam o grupo B_n .

O grupo de $braid\ B_n$ é gerado por n-1 elementos $R_1,...,R_{n-1}$, onde R_i é o elemento que troca a partícula na posição i com a partícula na posição i+1. Os geradores satisfazem as seguintes relações:

$$R_i R_i = R_i R_i, |i - j| < 2,$$
 (2.5.6)

$$R_i R_{i+1} R_i = R_{i+1} R_i R_{i+1}. (2.5.7)$$

Tais relações são melhor visualizadas de forma gráfica. A primeira é dada por

e a segunda, conhecida como relação de Yang-Baxter, é dada por

Como dito acima, a troca de partículas é dada por uma representação do grupo de braid no espaço de Hilbert. No caso de anyons Abelianos, tal representação é dada por $R_i = e^{i\pi\alpha_i}$, i.e., é dada por um fator de fase. Os anyons formam uma representação unidimensional do grupo de braid. Também podemos ter partículas que formam representações k-dimensionais do grupo de braid, os chamados anyons não-Abelianos. Falaremos mais disso mais tarde.

Vamos utilizar a analogia com plasmas para mostrar que os quasi-buracos são anyons. Também vamos mostrar que sua carga é de fato fracionária. Considere um estado de M quasi-buracos $|w_1,...,w_M\rangle$, dado pela função de onda

$$\langle z_1, ..., z_N | w_1, ..., w_M \rangle = \prod_{i=1}^N \prod_{j=1}^M (z_i - w_j) \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m e^{-\frac{1}{4l_B^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2}.$$

Nesta discussão, será importante utilizar o estado normalizado

$$|w\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z}} |w_1, ..., w_M\rangle,$$

onde

$$Z = \langle w_1, ..., w_M | w_1, ..., w_M \rangle = \int \prod_{i=1}^N dz_i d\bar{z}_i | \langle z_1, ..., z_N | w_1, ..., w_M \rangle |^2,$$

isto é,

$$Z = \int \prod_{i=1}^{N} dz_i d\bar{z}_i \exp\left(\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} \log|z_i - w_j|^2 + m \sum_{i < j} \log|z_i - z_j|^2 - \frac{1}{2l_B^2} \sum_{i=1}^{N} |z_i|^2\right).$$

Novamente, podemos considerar que Z é a função de partição de um sistema de física estatística. Escrevendo

$$Z = \int \prod_{i=1}^{N} dz_i d\bar{z}_i e^{-\beta U(z,w)},$$

temos que

$$\beta U(z, w) = -\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} \log|z_i - w_j|^2 - m \sum_{i < j} \log|z_i - z_j|^2 + \frac{1}{2l_B^2} \sum_{i=1}^{N} |z_i|^2,$$

onde $\beta = 2/m$, como no caso da analogia de plasmas. No entanto, agora temos uma força de Coulomb entre os elétrons nas posições z_i e algumas impurezas nas posições w_i .

Vamos utilizar a fase de Berry ganha por um quasi-buraco para calcular sua estatística e sua carga. Para isso, precisamos encontrar as conexões de Berry holomórfica

$$A_w(w, \bar{w}) = -i \langle w | \frac{\partial}{\partial w} | w \rangle,$$

e anti-holomórfica

$$A_{\bar{w}}(w,\bar{w}) = -i \langle w | \frac{\partial}{\partial \bar{w}} | w \rangle.$$

Temos que

$$\begin{split} \left\langle w\right|\frac{\partial}{\partial w}\left|w\right\rangle &=\frac{1}{\sqrt{Z}}\left\langle w_{1},...,w_{M}\right|\left(-\frac{1}{2Z^{3/2}}\partial_{w}Z\left|w_{1},...,w_{M}\right\rangle +\frac{1}{\sqrt{Z}}\partial_{w}\left|w_{1},...,w_{M}\right\rangle\right)\\ &=-\frac{1}{2Z^{2}}\partial_{w}Z\left\langle w_{1},...,w_{M}\middle|w_{1},...,w_{M}\right\rangle +\frac{1}{Z}\left\langle w_{1},...,w_{M}\middle|\partial_{w}\left|w_{1},...,w_{M}\right\rangle. \end{split}$$

Como $Z = \langle w_1, ..., w_M | w_1, ..., w_M \rangle$ e

$$\langle w_1,...,w_M | \partial_w | w_1,...,w_M \rangle = \partial_w \langle w_1,...,w_M | w_1,...,w_M \rangle = \partial_w Z,$$

pois $\langle w_1,...,w_M|$ é anti-holomórfico, temos que

$$A_w(w, \bar{w}) = -\frac{i}{2} \frac{1}{Z} \partial_w Z = -\frac{i}{2} \partial_w \log Z.$$

Do mesmo modo,

$$A_{\bar{w}}(w,\bar{w}) = \frac{i}{2}\partial_{\bar{w}}\log Z.$$

Então, para calcular as conexões de Berry, temos que derivar a função de partição Z com relação a w. Para realizar essa operação, vamos utilizar a analogia com plasmas. A função de partição descreve um plasma com impurezas nas posições w_i . Em certas condições, podemos observar o fenômeno da blindagem eletrostática, onde os elétrons nas posições z_i se organizam em torno do ponto w_i de modo a blindar o campo elétrico gerado pelas impurezas. Assim, vendo o plasma de longe, não conseguimos perceber a presença das impurezas. Para que isso aconteça, vamos supor que m é tal que o plasma está na fase líquida. Também vamos supor que as impurezas não estão próximas umas das outras. A energia real do sistema de plasmas com impurezas deve levar em conta a interação de Coulomb entre as impurezas, bem como o potencial gerado pelo fundo estático de impurezas. Tal energia é dada por

$$\beta U'(z, w) = -\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} \log|z_i - w_j|^2 - m \sum_{i < j} \log|z_i - z_j|^2 + \frac{1}{2l_B^2} \sum_{i=1}^{N} |z_i|^2$$
$$-\frac{1}{m} \sum_{i < j} \log|w_i - w_j|^2 + \frac{1}{2ml_B^2} \sum_{i=1}^{M} |w_i|^2.$$

A função de partição desse sistema é dada por

$$Z' = \int \prod_{i} dz_{i} d\bar{z}_{i} e^{-\beta U'(z,w)} = e^{-\frac{1}{m} \sum_{i < j} \log|w_{i} - w_{j}|^{2} + \frac{1}{2ml_{B}^{2}} \sum_{i=1}^{M} |w_{i}|^{2}} Z.$$

Ocorrendo a blindagem, não conseguimos identificar as posições das impurezas. Isso significa que a energia livre do sistema não pode depender de w_i . Logo, Z' é uma constante com respeito a w_i , e temos que

$$Z = Z' e^{\frac{1}{m} \sum_{i < j} \log|w_i - w_j|^2 - \frac{1}{2ml_B^2} \sum_{i=1}^M |w_i|^2}.$$
 (2.5.10)

Agora podemos calcular as conexões de Berry. Temos que

$$A_{w_i}(w, \bar{w}) = -\frac{i}{2} \frac{Z' \partial_{w_i} e^{\frac{1}{m} \sum_{i < j} \log|w_i - w_j|^2 - \frac{1}{2ml_B^2} \sum_{i=1}^M |w_i|^2}}{Z' e^{\frac{1}{m} \sum_{i < j} \log|w_i - w_j|^2 - \frac{1}{2ml_B^2} \sum_{i=1}^M |w_i|^2}}$$
$$= -\frac{i}{2} \left(\frac{1}{m} \sum_{i \neq i} \frac{1}{w_i - w_j} - \frac{1}{2ml_B^2} \bar{w}_i \right),$$

ou seja,

$$A_{w_i}(w,\bar{w}) = -\frac{i}{2m} \sum_{j \neq i} \frac{1}{w_i - w_j} + \frac{i}{4ml_B^2} \bar{w}_i.$$
 (2.5.11)

Do mesmo modo,

$$A_{\bar{w}_i}(w,\bar{w}) = \frac{i}{2m} \sum_{j \neq i} \frac{1}{\bar{w}_i - \bar{w}_j} - \frac{i}{4ml_B^2} w_i.$$
 (2.5.12)

Agora estamos em posição de calcular algumas propriedades dos quasiburacos. Considere um quasi-buraco na posição w. Vamos movê-lo adiabaticamente ao longo de um caminho fechado C (figura 22). Na região cuja fronteira é o caminho C, não há outros quasi-buracos. Ao final do percurso, seu estado ganha uma fase de Berry

$$e^{i\gamma} = e^{-i\oint_C [A_w(w,\bar{w})dw + A_{\bar{w}}(w,\bar{w})d\bar{w}]}$$

Como $1/(w-w_j)$ é analítica na região limitada por C, sua integral é nula. Segue que

$$\oint_C \left[A_w(w, \bar{w}) dw + A_{\bar{w}}(w, \bar{w}) d\bar{w} \right] = \frac{i}{4m l_B^2} \oint_C \left(\bar{w} dw - w d\bar{w} \right).$$

Como

$$\oint_C \bar{w}dw = 2iA,$$

onde A é a área limitada por C, segue que

$$\oint_C \left[A_w(w, \bar{w}) dw + A_{\bar{w}}(w, \bar{w}) d\bar{w} \right] = -\frac{1}{ml_B^2} = -\frac{eAB}{m\hbar} = -\frac{e\Phi}{m\hbar},$$



Figura 22: Para o cálculo da carga, fazemos um *anyon* circular em volta de uma região que não abriga outras partículas. Para o cálculo da estatística, fazemos o *anyon* circular ao redor de outro *anyon*.

onde $\Phi = AB$ é o fluxo magnético que passa por A. Logo,

$$\gamma = \frac{e\Phi}{m\hbar}$$

é a fase de Berry adquirida. No entanto, note que essa configuração é a mesma que a do efeito Aharonov-Bohm, onde o elétron adquire uma fase $\gamma=e\Phi/\hbar$ ao percorrer um caminho fechado ao redor do fluxo magnético. Então, se considerarmos que o quasi-buraco é uma partícula de carga $q_h=e/m$, podemos pensar que o que acontece aqui nada mais é que uma manifestação do efeito Aharonov-Bohm. Ou seja, um quasi-buraco nada mais é que uma partícula de carga

$$q_h = \frac{e}{m}.$$

Agora, vamos calcular a fase adquirida pela função de onda quando trocamos dois quasi-buracos. Considere um quasi-buraco na posição w_0 . Vamos movê-lo adiabaticamente ao longo de um caminho fechado C. Na região cuja fronteira é C, há outro quasi-buraco na posição w_1 (figura 22). Ao final do percurso, a função de onda do sistema adquire uma fase de Berry

$$e^{i\gamma} = \exp\left\{-i\oint_C \left[A_w(w,\bar{w})dw + A_{\bar{w}}(w,\bar{w})d\bar{w}\right]\right\}.$$

Vamos calcular a integral

$$\oint_C A_w(w,\bar{w})dw = -\frac{i}{2m} \sum_{j \neq 0} \oint_C \frac{dw}{w_0 - w_j} + \frac{i}{4ml_B^2} \oint_C \bar{w}dw.$$

O segundo termo nos dá a área cuja fronteira é C, e portanto nos dá a fase do efeito Aharonov-Bohm. O único termo da soma que é diferente de zero é j=1. A integral é igual a $2\pi i$. Logo, esse termo contribui com

$$\frac{\pi}{m}$$

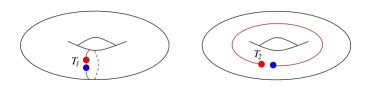


Figura 23: Operadores de translação ao longo de ciclos não-contráteis no toro.

para a fase de Berry. A integral $\oint_C A_{\bar{w}}(w,\bar{w})d\bar{w}$ nos dá a mesma contribuição de π/m . Logo, além da fase de Aharonov-Bohm, a função de onda adquire uma fase de

$$e^{-2\pi i/m}$$

Lembrando que uma troca dupla de partículas pode ser vista como uma rotação de uma partícula ao redor da outra, temos então que a fase adquirida pela troca dupla de dois quasi-buracos é

$$e^{2\pi i\alpha} = e^{-2\pi i/m}.$$

o que significa que

$$\alpha = -\frac{1}{m}$$

é a fase adquirida pela função de onda quando trocamos dois quasi-buracos. Como m é um número inteiro ímpar, a fase adquirida é fracionária, e segue que os quasi-buracos não são nem bósons nem férmions para $m \neq 1$, e sim anyons. Recentemente [19], a estatística das excitações presentes no $\nu = 1/3$ FQHE foi testada e foi comprovado experimentalmente que os quasi-buracos são de fato anyons, que adquirem uma fase de $\pi/3$ sob troca.

Degenerescência do estado fundamental. A existência de anyons no FQHE tem mais uma consequência interessante. O estado fundamental do FQHE é degenerado, e a dimensão do subespaço de estados fundamentais, também chamada de degenerescência do estado fundamental e denotada GSD, depende da topologia do espaço no qual os elétrons bidimensionais vivem.

Para ver isso, note que podemos criar do vácuo um par quasi-elétronquasi-buraco, fazê-los viajarem por um caminho fechado e depois juntá-los novamente, retornando o sistema ao vácuo. Suponha então que a superfície bidimensional na qual os elétrons se movem é um toro T^2 . O toro possui dois caminhos fechados não-contráteis fundamentais, α e β . Sejam T_{α} e T_{β} os operadores que transladam partículas ao longo dos dois caminhos nãocontráteis do toro (figura 23). Considere então que criamos um par quasielétron-quasi-buraco do vácuo, fazemos o quasi-buraco viajar primeiro por α , depois por β , de volta por α^{-1} e de volta por β^{-1} , voltando ao vácuo. Como as linhas de mundo se cruzam sempre, o caminho gerado por $T_{\alpha}T_{\beta}T_{\alpha}^{-1}T_{\beta}^{-1}$ equivale ao caminho no qual o quasi-buraco circula o quasi-elétron. Como são anyons, segue que

$$T_{\alpha}T_{\beta}T_{\alpha}^{-1}T_{\beta}^{-1} = e^{2\pi i/m}.$$
 (2.5.13)

Note que a relação

$$T_{\alpha}T_{\beta} = e^{2\pi i/m}T_{\beta}T_{\alpha}$$

é a mesma relação dos operadores de clock e shift

$$ZX = e^{2\pi i/m}XZ,$$

i.e., para m=2, nada mais são que as matrizes de Pauli σ^z e σ^x . Logo, a menor representação da álgebra (2.5.13) é m-dimensional, e é dada por

$$T_{\alpha} |n\rangle = e^{2\pi i n/m} |n\rangle$$
,

$$T_{\beta}|n\rangle = |n+1\rangle$$
.

Como T_{α} e T_{β} comutam com a Hamiltoniana, o estado fundamental do FQHE é degenerado, com $GSD=m^2$ no toro.

Temos então que a topologia do espaço é responsável pela degenerescência do estado fundamental no FQHE. Lembrando que, à temperatura zero, estados fundamentais correspondem às possíveis fases de um sistema quântico, as possíveis fases do FQHE têm uma origem topológica, e não são resultado das simetrias da Hamiltoniana. A presença de anyons e a degenerescência topológica fazem com que o FQHE seja o exemplo paradigmático de ordem topológica [20].

 $F\'{e}rmions\ compostos.$ O estado de Laughlin nos dá uma boa descrição para o FQHE a $\nu=1/m$. No entanto, existem outros fatores de preenchimento ν , como $\nu=2/5,3/7$, etc. Vamos introduzir uma abordagem complementar do FQHE em termos dos chamados $f\'{e}rmions\ compostos$. Nesta abordagem, consideramos, de forma intuitiva, que o campo magnético se decompõe em quantas de fluxos, e que cada elétron forma um estado ligado com m-1 fluxos. Se m é ímpar, m-1 é par, e o estado ligado ainda é fermiônico. De fato, circulando um estado em torno do outro, um elétron circula m-1 fluxos, o que gera uma fase de Aharonov-Bohm $\gamma=2\pi(m-1)$. Isto é, a fase adquirida em decorrência dos fluxos é trivial, e a única estatística que conta para o férmion composto é a estatística do elétron.

Para ver como a introdução de tais quasi-partículas nos ajuda a compreender melhor o FQHE, considere que temos $n = \nu AB/\Phi_0$ elétrons e que fazemos um férmion composto circular um caminho fechado em torno de uma área A. A função de onda adquire a fase

$$\gamma = 2\pi \left(\frac{AB}{\Phi_0} - (m-1)nA \right).$$

O primeiro termo é a fase de Aharonov-Bohm usual. O segundo termo vem do fato que o elétron circula os (m-1) fluxos ligados aos nA elétrons em A. Se considerarmos que os férmions compostos sentem um campo magnético efetivo reduzido $B^* = B - (m-1)n\Phi_0$, obtemos a fase de Aharonov-Bohm de volta:

$$\gamma = 2\pi \frac{AB^*}{\Phi_0}.$$

No entanto, se considerarmos que os férmions compostos sentem um campo reduzido, devemos também assumir que o fator de preenchimento é diferente. Para uma densidade de elétrons n/A fixa,

$$\nu B = \nu^* B^*,$$

isto é,

$$\nu = \nu^* \frac{1}{1 + (m-1)\nu^*}.$$

Note que, para $\nu^*=1,\ \nu=1/m$. Ou seja, o FQHE pode ser imaginado como o IQHE para férmions compostos. Mais ainda, se preenchermos $\nu^*>1$ níveis de Landau de férmions compostos, obtemos toda a série do FQHE. Por exemplo, para m=3, preenchendo $\nu^*=2$ níveis, temos o FQHE a $\nu=2/5$. Preenchendo $\nu^*=3$, obtemos o FQHE a $\nu=3/7$ e etc.

Logo, temos a seguinte figura: elétrons capturam quantas de fluxo, e a quasi-partícula resultante é um férmion. À baixas temperaturas e sob campos magnéticos muito intensos, tais férmions compostos se organizam em um IQHE, que pode ser utilizado para explicar o FQHE dos elétrons nus. Um fenômeno interessante acontece a $\nu=1/2$, quando o nível de Landau está preenchido pela metade. O campo magnético sentido pelos férmions compostos se anula. De fato, a densidade de elétrons é $n=B/2\Phi_0$. Segue que

$$B^* = B - 2n\Phi_0 = 0.$$

Os férmions compostos não se organizam em um IQHE, e sim formam um líquido de Fermi. Não iremos entrar em detalhes sobre isso aqui.

O estado de Moore-Read. O estado de Laughlin captura muitas das propriedades do FQHE a $\nu=1/m$ para m ímpar. No entanto, existem estados observados do FQHE a frações $\nu=n/m$, onde n é um número ímpar e m é

um número par. O exemplo mais notável é o caso onde $\nu = 5/2$, embora o sinal do caso $\nu = 7/2$ também seja bastante forte. Para entender o FQHE a $\nu = n/m$, com n par e m ímpar, vamos introduzir o estado de Moore-Read [21].

O estado de Moore-Read descreve o estado fundamental de um gás de N elétrons bidimensionais, onde N é um número par, a $\nu=1/m$, onde m também é par, e é dado por

$$\psi_{MR}(z_1, ..., z_N) = \Pr\left(\frac{1}{z_i - z_j}\right) \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m e^{-\frac{1}{4l_B^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2}.$$
 (2.5.14)

A diferença da (2.5.14) para a (2.5.1) está no termo

$$Pf\left(\frac{1}{z_i - z_j}\right),\,$$

que é o chamado Pfaffiano da matriz A cuja entrada $A_{ij}=1/(z_i-z_j)$. Note que A é uma matriz $N\times N$, com N sendo um número par. Como A é uma matriz anti-simétrica, i.e., $A_{ij}=-A_{ji}$, seu Pfaffiano pode ser calculado através da seguinte relação:

$$\det(A) = (\operatorname{Pf}(A))^2.$$

Uma outra forma de calcular o Pfaffiano de A é particionando N em N/2 pares de números, por exemplo $(12), (34), (56), \dots$ etc. O Pfaffiano é então dado por

$$Pf(A) = \mathcal{A}\left(A_{12}A_{34}A_{56}...\right),\,$$

onde \mathcal{A} é um operador que anti-simetriza em todos os índices. Por exemplo, para N=4,

$$Pf\left(\frac{1}{z_i - z_i}\right) = \frac{1}{z_1 - z_2} \frac{1}{z_3 - z_4} + \frac{1}{z_1 - z_3} \frac{1}{z_4 - z_2} + \frac{1}{z_1 - z_4} \frac{1}{z_2 - z_3}.$$

A presença do Pfaffiano faz com que a função de onda tenha menos zeros que o estado de Laughlin. Isso significa que os elétrons podem estar mais próximos uns dos outros. Vamos analisar a (2.5.14) para m=2 do ponto de vista de férmions compostos. O termo $\prod_{i< j} (z_i-z_j)^m$ representa a captura de m fluxos por cada elétron. Para m=2 então, cada elétron está preso a dois fluxos, formando um férmion composto. Vimos anteriormente que, no caso m=2, os férmions compostos não sentem campo magnético algum, e assim ao invés de gerarem um IQHE, eles se organizam para formar um líquido de Fermi. No caso do estado de Moore-Read, afirmamos sem demonstração que

temos a seguinte figura: os férmions compostos formam um líquido de Fermi e depois se condensam para formar um supercondutor BCS, do tipo p + ip. Mais detalhes sobre essa física podem ser encontrados na referência [22].

Podemos construir quasi-buracos no estado de Moore-Read do mesmo modo que fizemos para o estado de Laughlin. Assim, um quasi-buraco na posição w é representado pelo estado

$$\psi(z_1, ..., z_N; w) = \prod_{i=1}^{N} (z_i - w) \psi_{MR}(z_1, ..., z_N).$$
 (2.5.15)

Mas também podemos construir um estado de quasi-buracos alterando o Pfaffiano. Por exemplo, o seguinte estado

$$\psi(z; w) = \tilde{\psi}(z; w) e^{-\frac{1}{4l_B^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2},$$

onde

$$\tilde{\psi}(z;w) = \Pr\left(\frac{(z_i - w_1)(z_j - w_2) + (z_i - w_2)(z_j - w_1)}{z_i - z_j}\right) \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m,$$

contém os mesmos fatores $\prod_{i,j} (z_i - w_1)(z_j - w_2)$ que associamos a um estado de quasi-buracos nas posições w_1 e w_2 . Cada um desses quasi-buracos pode ser pensado como um meio-fluxo, de carga

$$q_h = \frac{e}{2m}.$$

Note que há uma certa arbitrariedade na construção de estados de quasiburacos. Por exemplo, para construir um estado de 4 quasi-buracos, podemos considerar o Pfaffiano

$$Pf_{(12)(34)}(z) = Pf\left(\frac{(z_i - w_1)(z_i - w_2)(z_j - w_3)(z_j - w_4) + i \leftrightarrow j}{z_i - z_j}\right),\,$$

como também poderíamos considerar outras combinações de 4 números em pares, obtendo assim os Pfaffianos $Pf_{(13)(24)}(z)$ ou $Pf_{(14)(23)}(z)$. Ou seja, um estado de vários quasi-buracos é degenerado. De fato, existem

$$dim\mathcal{H} = 2^{n-1}$$

estados de 2n quasi-buracos. Essa degenerescência é bastante peculiar. Por exemplo, o espaço de Hilbert de N qubits possui dimensão 2^N , pois cada qubit pode estar em dois estados. Aqui, o espaço de Hilbert de 2n quasi-buracos possui dimensão 2^{n-1} , bem menor do que esperaríamos se os quasi-buracos

possuíssem algum tipo de grau de liberdade interno. Isso nos indica que tal degenerescência não se deve a propriedades particulares de cada quasi-buraco, e sim a uma propriedade global do sistema de quasi-buracos.

Como existem 2^{n-1} estados de 2n quasi-buracos possíveis, quando realizamos uma evolução adiabática ao longo de um caminho fechado no espaço de configurações dos quasi-buracos, o sistema pode retornar a qualquer um dos 2^{n-1} estados. Isto é, a fase de Berry associada a esta evolução é uma matrix unitária $2^{n-1} \times 2^{n-1}$. Portanto, quasi-buracos são anyons não-Abelianos.

2.6 Teoria de Chern-Simons

Nas seções anteriores, procuramos entender o efeito Hall quântico a partir de uma descrição microscópica do 2DEG. Nos deparamos com várias complicações, que são justificadas pelo fato de que é praticamente impossível resolver a equação de Schrödinger para um sistema de muitos corpos (fortemente interagentes no caso do FQHE). Para driblar tais dificuldades, vamos nos inspirar na física de altas energias e procurar uma descrição do efeito Hall quântico através de uma teoria efetiva.

A ideia é a seguinte: suponha que estamos observando o 2DEG de muito longe, de modo que não temos como saber o que há dentro dele, i.e., quais os graus de liberdade miscroscópicos que compõem o sistema. Tudo o que conseguimos experimentar é a resposta do sistema como um todo a estímulos vindos do exterior, como por exemplo a uma pequena perturbação no campo magnético. Uma teoria efetiva do efeito Hall quântico deve ser capaz de descrever tal resposta.

Antes de começarmos a busca por uma teoria efetiva, vamos estabelecer algumas convenções. Primeiramente, vamos sempre considerar que o potencial vetor A_{μ} não é dinâmico, isto é, é um parâmetro externo que podemos ajustar livremente. Mais ainda, consideramos que o campo A_{μ} descreve flutuações em torno do campo magnético que gera o efeito Hall quântico. Isto é, temos uma amostra que apresenta um efeito Hall quântico e aplicamos sobre ela uma perturbação na forma de A_{μ} . Lembramos aqui que, de um ponto de vista de teoria de campos, o campo de gauge A_{μ} sempre se acopla à corrente J^{μ} , que representa os graus de liberdade do sistema, através do termo

$$S = \int d^3x J^{\mu} A_{\mu}, \qquad (2.6.1)$$

onde realizamos a integral sobre um espaço (2+1)-dimensional. Tal interação é invariante sob transformações de gauge $A_{\mu} \to A_{\mu} + \partial_{\mu}\omega$, para qualquer campo escalar ω , se a corrente for conservada:

$$\partial_{\mu}J^{\mu}=0.$$

O efeito Hall quântico inteiro revisitado. Vamos tentar construir uma teoria efetiva para o IQHE. Suponha que temos uma amostra que apresenta o IQHE e aplicamos um campo A_{μ} adicional sobre ela. Queremos descobrir como o sistema responde, mesmo que não saibamos nada sobre os seus graus de liberdade internos.

Um sistema quântico arbitrário pode ser descrito pelo seu funcional gerador

 $Z[A_{\mu}] = \int \mathcal{D}\Phi e^{\frac{i}{\hbar}S[\Phi;A_{\mu}]},$

onde Φ representa todos os graus de liberdade microscópicos do sistema e $S[\Phi; A_{\mu}]$ é sua $a \xi \tilde{a} o$. O campo A_{μ} é um parâmetro externo. A teoria efetiva é obtida realizando a integral sobre todos os graus de liberdade, obtendo assim o funcional

$$Z[A_{\mu}] = e^{\frac{i}{\hbar}S_{eff}[A_{\mu}]},$$
 (2.6.2)

onde $S_{eff}[A_{\mu}]$ é a ação efetiva, que depende apenas dos parâmetros externos A_{μ} . Logo, a ação efetiva guarda informação sobre a resposta do sistema à variação do parâmetro A_{μ} . Por exemplo, se $S_{eff}[A_{\mu}]$ é dada pela (2.6.1), segue que

$$\frac{\delta S_{eff}[A_{\mu}]}{\delta A_{\mu}(x)} = J^{\mu}(x), \qquad (2.6.3)$$

isto é, a variação funcional da ação efetiva com respeito ao campo A_{μ} nos dá a corrente de matéria J^{μ} .

Como não temos acesso à Lagrangiana real do sistema, não podemos realizar a integral sobre os campos Φ para encontrar a ação efetiva. Temos então que adivinhar a forma de S_{eff} . Vamos assumir que o sistema apresenta algumas propriedades que irão facilitar a construção da nossa teoria. A primeira delas é a seguinte: para campos A_{μ} suficientementes pequenos, o não observamos excitações. Isso significa que o sistema apresenta um gap de energia ΔE entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, o que o torna um isolante. Assim, a ação efetiva descreve o estado fundamental do nosso sistema.

Como o nosso único parâmetro é $A_{\mu} = (\phi, \mathbf{A})$, a ação efetiva deve ser um funcional de combinações destes campos e suas derivadas. O funcional mais simples que podemos construir é a integral

$$\int d^dx f(A_\mu),$$

onde d é a dimensão do espaço-tempo e $f(A_{\mu})$ é algum polinômio de A_{μ} e suas derivadas. Note que considerar este funcional é razoável, visto que estamos

interessados no que acontece localmente na amostra, mas a estamos vendo de longe. Estamos considerando também que A_{μ} não é muito grande, o que significa que apenas potências pequenas de A_{μ} devem aparecer em S_{eff} . Mais ainda, consideramos que a taxa de variação de A_{μ} com a distância também é pequena, o que por sua vez implica que apenas potências baixas de $\partial_{\mu}A_{\mu}$ devem compor S_{eff} .

Uma importante propriedade que devemos considerar que o sistema possui é a invarância por transformações de gauge

$$A_{\mu} \to A_{\mu} + \partial_{\mu}\omega$$
,

para qualquer campo escalar ω . Assumir essa propriedade é importante pois, como vimos, observáveis físicos são obtidos diretamente através de S_{eff} , e estes devem com certeza ser invariantes sob gauge. Assim, podemos considerar que o funcional S_{eff} é uma integral de potências baixas do campo elétrico,

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t},$$

e do campo magnético

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$$
.

Vamos considerar o caso em que d=3+1 dimensões. A invariância por rotações impede a presença de termos lineares em \boldsymbol{E} e \boldsymbol{B} (pois, sendo vetores, não são invariantes por rotações). Logo, a ação efetiva S_{eff} com potências mais baixas de \boldsymbol{E} e \boldsymbol{B} que podemos considerar em (3+1)d é dada por

$$S_{eff}[A] = \frac{1}{2} \int d^4x \left(\epsilon \mathbf{E}^2 - \frac{1}{\mu} \mathbf{B}^2 + \lambda \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \right).$$

Colocamos o fator de $\frac{1}{2}$ por conveniência futura. No gauge em que $\partial_t \mathbf{A} = 0$, $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ é igual a uma derivada total, i.e.,

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = -\nabla \phi \cdot \nabla \times \mathbf{A} = -\nabla \cdot (\phi \nabla \times \mathbf{A}),$$

e portanto, assumindo que os campos vão a zero na fronteira da região sobre a qual estamos integrando, podemos desprezar este termo. Temos então

$$S_{eff}[A] = \frac{1}{2} \int d^4x \left(\epsilon \mathbf{E}^2 - \frac{1}{\mu} \mathbf{B}^2 \right).$$

Tal ação descreve cargas e correntes livres, como na teoria de Maxwell usual. De fato, se considerarmos que a densidade de carga ρ é dada pela (2.6.3), i.e.,

$$\rho = \frac{\delta S_{eff}[A]}{\delta \phi(y)},$$

temos que

$$\frac{\delta S_{eff}[A]}{\delta \phi(y)} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\epsilon}{2\varepsilon} \left[\int d^4x \nabla (\phi(x) + \varepsilon \delta(x - y)) \cdot \nabla (\phi(x) + \varepsilon \delta(x - y)) - \int d^4x \nabla \phi(x) \nabla \phi(x) \right]$$
$$= \epsilon \int d^4x \nabla \phi(x) \cdot \nabla \delta(x - y).$$

Como

$$\nabla \cdot (\delta(x-y)\nabla\phi(x)) = \nabla\phi(x) \cdot \nabla\delta(x-y) + \delta(x-y)\nabla^2\phi(x),$$

temos que, desprezando os termos de superfície,

$$\epsilon \int d^4x \nabla \phi(x) \cdot \nabla \delta(x-y) = -\epsilon \int d^4x \nabla^2 \phi(x) \delta(x-y) = \epsilon \nabla^2 \phi(y),$$

isto é,

$$-\nabla^2 \phi = \frac{\rho}{\epsilon},$$

que é a equação de Poisson para o potencial elétrico ϕ . Logo, ρ dada pela derivada da ação efetiva de fato é a densidade de carga elétrica. Mais ainda, considerando agora a corrente J dada por

$$J_i = \frac{\delta S_{eff}[A]}{\delta A_i(y)},$$

para i = 1, 2, 3, temos que

$$\frac{\delta S_{eff}[A]}{\delta A_i(y)} = \frac{1}{\mu} \int d^4x \varepsilon^{ijk} \varepsilon_{imn} \partial_j A_k(x) \partial^m \delta(x-y).$$

Integrando por partes e desprezando o termo de superfície, temos que

$$\int d^4x \varepsilon^{ijk} \varepsilon_{imn} \partial_j A_k(x) \partial^m \delta(x - y) = -\int d^4x \varepsilon^{ijk} \varepsilon_{imn} \partial^m \partial_j A_k(x) \delta(x - y)$$
$$= -\varepsilon^{ijk} \varepsilon_{imn} \partial^m \partial_j A_k(y),$$

isto é, como

$$\varepsilon^{ijk}\varepsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km},$$

segue que

$$\varepsilon^{ijk}\varepsilon_{imn}\partial^m\partial_jA_k(y) = \partial_j\partial^jA_n(y) - \partial_n\partial^kA_k(y).$$

No gauge de Coulomb, $\partial^k A_k = \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, e segue que

$$-\partial^j \partial_j A_i = \mu J_i,$$

i.e.,

$$\nabla^2 \boldsymbol{A} = -\mu \boldsymbol{J},$$

que é a equação de Poisson para o potencial vetor \boldsymbol{A} . Assim, \boldsymbol{J} dado pela ação efetiva de fato pode ser interpretado como a corrente elétrica. Os parâmetros μ e ϵ aqui são arbitrários e podem ser escolhidos de acordo com o meio em questão.

Agora, vamos considerar o caso em que d=2+1 dimensões. Nesta situação, além dos termos de Maxwell mostrados acima, podemos considerar a seguinte contribuição para a ação efetiva:

$$S_{CS}[A] = \frac{k}{4\pi} \int d^3x \epsilon^{\mu\nu\rho} A_\mu \partial_\nu A_\rho, \qquad (2.6.4)$$

onde $\mu, \nu \rho = 0, 1, 2$ e $\epsilon^{\mu\nu\rho}$ é o símbolo de Levi-Civita. Tal termo é chamado $a \xi \tilde{a} o de Chern-Simons$ ao nível k. Note que a a $\xi \tilde{a}$ o de Chern-Simons apresenta as propriedades que desejamos que uma a $\xi \tilde{a}$ o efetiva possua. De fato, apenas potências baixas do campo de gauge e de suas derivadas contribuem para a a $\xi \tilde{a}$ o. Mais ainda, $S_{CS}[A]$ é invariante por rota $\xi \tilde{a}$ os. Para ver isso, suponha que realizamos uma rota $\xi \tilde{a}$ o

$$x^{\mu} \rightarrow x^{\prime \mu} = \Omega^{\mu}_{\nu} x^{\nu}$$

onde Ω^{μ}_{ν} são elementos de uma matriz $\Omega \in SO(d)$. A medida de integração d^3x é claramente invariante, pois $\det \Omega = 1$. Temos que, como

$$A_{\mu} = \Omega^{\nu}_{\mu} A'_{\nu},$$

$$\epsilon^{\mu\nu\rho}A_{\mu}\partial_{\nu}A_{\rho} \to \epsilon^{\mu\nu\rho}\Omega^{\mu'}_{\mu}\Omega^{\nu'}_{\nu}\Omega^{\rho'}_{\rho}A'_{\mu'}\partial_{\nu'}A'_{\rho'}.$$

Utilizando a identidade

$$\epsilon^{\mu\nu\rho}\Omega^{\mu'}_{\mu}\Omega^{\nu'}_{\nu}\Omega^{\rho'}_{\rho} = \det\Omega\epsilon^{\mu'\nu'\rho'},$$

segue que o integrando também é invariante, e portanto a ação de Chern-Simons é invariante por rotações.

A invariância por transformações de gauge da ação de Chern-Simons é um pouco mais sutil. Considere a transformação $A_{\mu} \to A_{\mu} + \partial_{\mu}\omega$, onde ω é um campo escalar qualquer. Segue que

$$\epsilon^{\mu\nu\rho}A_{\mu}\partial_{\nu}A_{\rho} \to \epsilon^{\mu\nu\rho}(A_{\mu} + \partial_{\mu}\omega)\partial_{\nu}(A_{\rho} + \partial_{\rho}\omega),$$

ou seja,

$$\epsilon^{\mu\nu\rho}A_{\mu}\partial_{\nu}A_{\rho} \to \epsilon^{\mu\nu\rho}(A_{\mu}\partial_{\nu}A_{\rho} + A_{\mu}\partial_{\nu}\partial_{\rho}\omega + \partial_{\mu}\omega\partial_{\nu}A_{\rho} + \partial_{\mu}\omega\partial_{\nu}\partial_{\rho}\omega).$$

O termo $\epsilon^{\mu\nu\rho}\partial_{\mu}\omega\partial_{\nu}\partial_{\rho}\omega=0$ devido à antissimetria do tensor de Levi-Civita. O termo

$$\epsilon^{\mu\nu\rho}(A_{\rho}\partial_{\nu}\partial_{\mu}\omega + \partial_{\mu}\omega\partial_{\nu}A_{\rho}) = \epsilon^{\mu\nu\rho}\partial_{\nu}(A_{\rho}\partial_{\mu}\omega)$$

é uma derivada total, e em muitos casos podemos considerar que sua integral é nula. No entanto, em alguns casos tal termo não desaparece. Temos que pensar um pouco mais sobre as condições que devemos impor em S_{CS} para que a invariância por gauge esteja sempre garantida. Voltaremos a falar disso em breve.

É importante notar que a ação de Chern-Simons quebra tanto a simetria por paridade quanto a simetria por reversão temporal. De fato, a transformação de paridade em duas dimensões é dada por

$$x^0 \to x^0, \ x^1 \to -x^1, \ x^2 \to x^2.$$

A medida de integração d^3x não muda, pois apesar de $x^1 \to -x^1$, os limites de integração mudam de $\int_{-\infty}^{\infty} \to \int_{\infty}^{-\infty} = -\int_{-\infty}^{\infty}$. O campo de gauge se transforma como

$$A_{\mu} = A_{\nu}^{\prime} \frac{\partial x^{\prime \nu}}{\partial x^{\mu}},$$

i.e.,

$$A_0 \to A_0, \ A_1 \to -A_1, \ A_2 \to A_2.$$

As derivadas se transformam de forma similar:

$$\partial_0 \to \partial_0, \partial_1 \to -\partial_1, \partial_2 \to \partial_2.$$

Assim, como cada termo da soma $\epsilon^{\mu\nu\rho}A_{\mu}\partial_{\nu}A_{\rho}$ é composto ou por um A_1 ou por um ∂_1 , $\epsilon^{\mu\nu\rho}A_{\mu}\partial_{\nu}A_{\rho} \rightarrow -\epsilon^{\mu\nu\rho}A_{\mu}\partial_{\nu}A_{\rho}$, e S_{CS} não é invariante sob paridade. Isto indica que o termo de Chern-Simons deve aparecer apenas em sistemas que apresentam quebra de paridade, como de fato o efeito Hall quântico apresenta, onde a paridade é quebrada pela presença de um campo magnético B.

Utilizando a (2.6.3), vamos calcular a corrente J^{μ} induzida pela ação de Chern-Simons. Primeiramente, temos que a densidade de cargas $J^0=\rho$ é dada por

$$\rho = J^{0}(y) = \frac{\delta S_{CS}[A]}{\delta A_{0}(y)}.$$
(2.6.5)

Isto é, como

$$\frac{\delta S_{CS}[A]}{\delta A_0(y)} = \frac{k}{4\pi} \int d^3x (\delta(x-y)\partial_1 A_2 + A_1 \partial_2 \delta(x-y))$$
$$-A_2 \partial_1 \delta(x-y) - \delta(x-y)\partial_2 A_1)$$
$$= \frac{k}{2\pi} (\partial_1 A_2 - \partial_2 A_1)$$
$$= \frac{k}{2\pi} B,$$

onde utilizamos que $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$, segue que

$$\rho = \frac{k}{2\pi}B. \tag{2.6.6}$$

Devemos pensar neste resultado da seguinte forma: B é o campo "adicional" que aplicamos no sistema, uma perturbação. A densidade de cargas ρ é a densidade de cargas adicional que induzimos ao aplicarmos B. Sendo assim, temos que a mudança na densidade de cargas é proporcional ao campo externo aplicado B. Se identificarmos $k=e^2\nu/\hbar$, onde ν é o número de níveis de Landau preenchidos, temos exatamente o que obteríamos no caso do IQHE.

Agora, vamos calcular a corrente J^i , dada por

$$J^{i}(y) = \frac{\delta S_{CS}[A]}{\delta A_{i}(y)}.$$
(2.6.7)

Temos que

$$\frac{\delta S_{CS}[A]}{\delta A_1(y)} = \frac{k}{4\pi} \int d^3x (\delta(x-y)\partial_2 A_0 + A_2 \partial_0 \delta(x-y) - A_0 \partial_2 \delta(x-y) - \delta(x-y)\partial_0 A_2)$$
$$= \frac{k}{2\pi} (\partial_2 A_0 - \partial_0 A_2)$$
$$= \frac{k}{2\pi} (\partial_2 \phi - \partial_0 A_2).$$

Do mesmo modo,

$$\frac{\delta S_{CS}[A]}{\delta A_2(y)} = \frac{k}{4\pi} \int d^3x (A_0 \partial \delta(x - y) + \delta(x - y) \partial_0 A_1 - \delta(x - y) \partial_1 A_0 - A_1 \partial_0 \delta(x - y)$$
$$= \frac{k}{2\pi} (\partial_0 A_1 - \partial_1 A_0)$$
$$= \frac{k}{2\pi} (\partial_0 A_1 - \partial_1 \phi).$$

Ou seja, como $\boldsymbol{E} = -\nabla \phi - \dot{\boldsymbol{A}}$, podemos escrever

$$J^i = -\frac{k}{2\pi} \epsilon_j^i E_j, \qquad (2.6.8)$$

onde i,j=1,2 e ϵ^i_j é o tensor de Levi-Civita em duas dimensões. Temos exatamente o termo não-diagonal da lei de Ohm, que nos dá a condutividade de Hall

$$\sigma_{xy} = \frac{k}{2\pi}.\tag{2.6.9}$$

Ou seja, aplicando uma perturbação na forma de um campo elétrico, temos como resposta uma corrente diagonal adicional. Se identificarmos $k=e^2\nu/\hbar$, temos exatamente a condutividade de Hall quantizada que observamos no IQHE.

Portanto, o termo de Chern-Simons reproduz a física do transporte de cargas observada no IQHE, contando que identifiquemos $k=e^2\nu/\hbar$. A pergunta então é: existe alguma motivação física para fazermos isso? A resposta veremos a seguir.

Para mostrar que de fato a constante k deve ser um múltiplo inteiro de e^2/\hbar , vamos considerar o IQHE à temperatura finita. A função de partição de um sistema quântico à temperatura finita é dada por

$$Z = \text{Tr}e^{-\beta H}, \qquad (2.6.10)$$

onde $\beta=1/k_BT$, sendo T a temperatura, e H é a Hamiltoniana do sistema. Considere, por exemplo, que o sistema quântico é formado por uma partícula de massa m e coordenada q se movendo em uma dimensão espacial, na presença de um potencial V(q). A amplitude de probabilidade de encontrar tal partícula, que inicialmente estava na posição q_i no tempo $t=t_i$, na posição q_f no tempo $t=t_f$, é dada pela integral de caminhos

$$\langle q_f|e^{-\frac{i}{\hbar}(t_f-t_i)H}|q_i\rangle = \int_{q(0)=q_i}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}qe^{\frac{i}{\hbar}S}, \qquad (2.6.11)$$

onde S=S[q] é a ação clássica do sistema, dada por

$$S[q] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q) \right]. \tag{2.6.12}$$

Ou seja, a amplitude de encontrar a partícula em q_f dado que ela estava em q_i , passado-se um tempo $t_f - t_i$, é dada pela soma sobre todos os caminhos que a partícula pode percorrer, dado que ela comece em q_i e termine em q_f ,

ponderada por um fator de fase que depende da ação clássica da partícula. Note que há uma certa semelhança entre a função de partição Z e a amplitude $\langle q_f|e^{-\frac{i}{\hbar}(t_f-t_i)H}|q_i\rangle$. De fato, podemos escrever a função de partição em termos de uma integral de caminhos. Para tanto, precisamos primeiro realizar uma rotação de Wick na coordenada temporal do sistema. Isto é, realizamos a transformação

$$\tau = it$$
.

que mapeia o tempo "real" (ou melhor, Minkowskiano) t ao tempo "imaginário" (ou melhor, Euclideano) τ . Com essa transformação, a ação S se torna

$$iS[q] \rightarrow -\int_0^{-i\tau} d\tau' \left[\frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V(q)\right] = -S_E,$$

onde S_E é a chamada ação Euclideana. Na fórmula acima, fixamos $t_i=0$ e $t_f=t$, por conveniência.

Agora, vamos considerar a amplitude

$$\langle q_f | e^{-\frac{i}{\hbar}\beta H} | q_i \rangle = \int_{q(0)=q_i}^{q(\beta)=q_f} \mathcal{D}q e^{-\frac{1}{\hbar}S_E}.$$

Podemos pensar em tal objeto como a amplitude de encontrar a partícula em q_f dado que passou um tempo β . Se identificarmos $q_i = q_f$, temos que $\langle q_i|e^{-\frac{i}{\hbar}\beta H}|q_i\rangle$ é a amplitude de encontrar a partícula de volta em q_i , passado um tempo β . Somando sobre todas posições iniciais q_i possíveis, temos nada menos que o traço de $e^{-\frac{i}{\hbar}\beta H}$ na base das posições iniciais:

$$Z = \operatorname{Tr} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta H} = \int dq_i \langle q_i | e^{-\frac{i}{\hbar}\beta H} | q_i \rangle.$$

Ou seja, podemos escrever a função de partição em termos de uma integral de caminhos da seguinte forma:

$$Z = \int dq_i \int_{q(0)-q_i}^{q(\beta)=q_i} \mathcal{D}q e^{-\frac{1}{\hbar}S_E},$$

i.e.,

$$Z = \int_{q(0)=q(\beta)} \mathcal{D}q e^{-\frac{1}{\hbar}S_E}.$$
 (2.6.13)

Isto é, somamos sobre todos os caminhos fechados possíveis, sem restrição de posição para iniciarmos. O único vínculo é que devemos voltar ao ponto

de partida quando $\tau = \beta$. Isto pode ser resumido dizendo que o tempo Euclideano τ é periódico, de periódo β , i.e.,

$$\tau = \tau + \beta$$

Ou seja, em duas dimensões espaciais, quando estamos considerando o funcional gerador (2.6.13), estamos efetivamente trabalhando num espaçotempo equivalente a $\mathbb{R}^2 \times S^1$, onde a direção temporal é dada pelo círculo S^1 parametrizado por $\tau \in [0, \beta)$.

Tudo isto se aplica à teoria quântica de campos, em particular à teoria efetiva (2.6.2) dada pela ação de Chern-Simons (2.6.4). Isto é, a função de partição para a teoria de Chern-Simons à temperatura finita é obtida realizando-se a mudança da ação de Lorentziana para Euclideana e compactificando o tempo τ em um círculo S^1 , de período β . No entanto, note que a presença de $\epsilon^{\mu\nu\rho}$ resulta em um fator de i à frente da ação Euclideana de Chern-Simons. De fato, existem termos no integrando como $A_0\partial_1A_2$ que não são multiplicados por -i quando realizamos a rotação de Wick, e portanto não podemos cancelar sempre o fator de -i que obtemos da medida de integração. Logo, a integral de caminhos Euclideana ainda é dada pela (2.6.2).

Agora, vamos analisar a ação de Chern-Simons à temperatura finita, o que equivale a considerar que o tempo τ assume valores em um círculo S^1 , de circunferência igual a β , i.e., $\tau = \tau + \beta$.

Lembre que, sob uma transformação de gauge $A_{\mu} \to A_{\mu} + \partial_{\mu}\omega$, a função de onda do sistema é multiplicada por um fator $e^{ie\omega/\hbar}$. Ou seja, podemos considerar um ω periódico, como por exemplo

$$\omega = \frac{2\pi\hbar\tau}{e\beta},$$

que a transformação da função de onda não muda. Este tipo de transformação de gauge é conhecido como uma transformação grande, no sentido de que não pode ser conectada à identidade continuamente. Utilizando tal ω , o potencial elétrico $\phi=A_0$ se transforma como

$$\phi \to \phi + \frac{2\pi\hbar}{e\beta},$$

i.e., é transladado por um termo constante.

Além de considerar o tempo periódico, vamos considerar também que o sistema vive em uma esfera S^2 . Assim, podemos definir um fluxo magnético furando sua superfície, dado por

$$\frac{1}{4\pi} \int_{S^2} d^2 x F_{12} = \frac{\hbar}{e},$$

onde $F_{\mu\nu} = \partial_{\nu}A_{\mu} - \partial_{\mu}A_{\nu}$. Note que tal configuração implica a existência de um monopolo magnético no centro de S^2 .

Com isso em mente, vamos calcular a ação de Chern-Simons para o caso em que $A_0 = \phi = \text{constante}$. Temos que

$$S_{CS}[A] = \frac{k}{4\pi} \int_{S^2} d^2x \int_{S^1} d\tau \, \epsilon^{\mu\nu\rho} A_\mu \partial_\nu A_\rho$$

$$= \frac{k}{4\pi} \int_{S^2} d^2x \int_{S^1} d\tau \left[A_0(\partial_1 A_2 - \partial_2 A_1) + A_1(\partial_2 A_0 - \partial_0 A_2) + A_2(\partial_0 A_1 - \partial_1 A_0) \right]$$

$$= \frac{k}{4\pi} \int_{S^2} d^2x \int_{S^1} d\tau \left[-A_0 F_{12} + A_1 F_{02} + A_2 F_{10} \right].$$

Vamos focar no primeiro termo. Como $A_0 = \phi$ é constante, temos que

$$\frac{k}{4\pi} \int_{S^2} d^2x \int_{S^1} d\tau A_0 F_{12} = \frac{k\hbar}{e} \beta \phi.$$

Logo, se realizarmos uma transformação de gauge $\phi \to \phi + \frac{2\pi\hbar}{e\beta}$, tal termo não é invariante, mas ganha um termo adicional igual a

$$\frac{2\pi\hbar^2k}{e^2}.$$

No entanto, sabemos que devemos considerar $S_{CS}[A]$ como uma ação efetiva, e que o objeto físico é o funcional gerador

$$Z[A] = e^{\frac{i}{\hbar}S_{CS}[A]}.$$

Assim, o funcional gerador é invariante se

$$\frac{\hbar k}{e^2} = \nu \in \mathbb{Z}.$$

Ou seja, escolhendo $k = \frac{e^2 \nu}{\hbar}$, temos que a teoria efetiva de Chern-Simons é invariante por gauge, e ainda por cima obtemos que tal teoria consegue descrever a condutividade de Hall do IQHE, sendo assim uma boa candidata a uma teoria efetiva do efeito Hall quântico inteiro.

O efeito Hall quântico fracionário revisitado. Vimos que a teoria de Chern-Simons é uma ótima candidata a uma teoria efetiva do IQHE. Para chegar à teoria de Chern-Simons, assumimos apenas a existência de um gap de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, de modo que não existam graus de liberdade dinâmicos que possam afetar a física de baixas energias. A consequência natural dessa hipótese é o IQHE. Assim,

temos que mudar alguma coisa em nossa hipótese se esperamos que a ação de Chern-Simons também capture alguns aspectos do FQHE.

Assumimos então que não existem graus de liberdade dinâmicos que afetam a física de baixas energias, preservando assim o gap que também é observado no FQHE. No entanto, existem graus de liberdade emergentes, que chamaremos de topológicos por motivos que se mostrarão claros a seguir, que podem afetar a física de baixas energias. Isto é, vamos assumir que os elétrons se organizam coletivamente para formar um campo de gauge emergente, com simetria de gauge U(1). Este campo será responsável pelo FQHE. Os detalhes mostraremos a seguir.

Considere que o comportamento coletivo dos elétrons bidimensionais é descrito por um campo de gauge U(1) a_{μ} . A ação mais óbvia que podemos escrever para um campo de gauge U(1) é a ação de Maxwell

$$S_M = -\frac{1}{4g^2} \int d^3x f_{\mu\nu} f^{\mu\nu}, \qquad (2.6.14)$$

onde $f_{\mu\nu}=\partial_{\mu}a_{\nu}-\partial_{\nu}a_{\mu}$. Extremizando tal ação, obtemos a equação de movimento

$$\partial_{\mu}f^{\mu\nu} = 0. \tag{2.6.15}$$

Com $a_{\mu} = (-a_0, \boldsymbol{a}), \boldsymbol{E} = -\nabla a_0 - \partial_t \boldsymbol{a}$ e $B = \partial_x a_y - \partial_y a_x$, tal equação se traduz nas seguintes:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 0$$
.

$$\partial_t E_x = -\partial_u B, \ \partial_t E_u = -\partial_x B,$$

que são as equações de Maxwell em 2+1 dimensões. Assumindo uma solução do tipo onda $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)}$, $B = B_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)}$, o vetor de onda \mathbf{k} e a amplitude \mathbf{E}_0 devem ser tais que

$$k_x E_{0x} + k_y E_{0y} = 0, \ k_x E_{0x} - k_y E_{0y} = 0,$$

o que fixa uma única direção não-nula de propagação da onda (por exemplo, se $E_{0x} = 0$, $k_y = 0$ e a onda se propaga apenas ao longo da direção x), o que significa que a teoria descreve um fóton com um único grau de liberdade (o modo na direção que a onda se propaga).

Como vimos anteriormente, em 2+1 dimensões, uma teoria de gauge U(1) admite um termo correspondente à ação de Chern-Simons

$$S_{CS} = \frac{k}{4\pi} \int d^3x \epsilon^{\mu\nu\rho} a_\mu \partial_\nu a_\rho, \qquad (2.6.16)$$

onde $k = e^2 \nu / \hbar$, com $\nu \in \mathbb{Z}$ para garantir a invariância por gauge de S_{CS} . O efeito da ação de Chern-Simons é tornar massivo o fóton descrito pela ação de Maxwell. Para ver isso, vamos considerar a teoria descrita pela ação

$$S = S_M + S_{CS} = \int d^3x \left(-\frac{1}{4q^2} f_{\mu\nu} f^{\mu\nu} + \frac{k}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} a_\mu \partial_\nu a_\rho \right).$$

A equação de movimento é obtida através da equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_{\mu}} = \partial_{\nu} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\nu} a_{\mu})} \right),$$

onde

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4g^2} f_{\mu\nu} f^{\mu\nu} + \frac{k}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} a_{\mu} \partial_{\nu} a_{\rho}$$

é a densidade Lagrangeana do sistema. Como

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4g^2} g^{\rho\mu} g^{\sigma\nu} f_{\mu\nu} f_{\rho\sigma} + \frac{k}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} a_{\mu} \partial_{\nu} a_{\rho}$$
$$= -\frac{1}{4g^2} g^{\rho\mu} g^{\sigma\nu} (\partial_{\mu} a_{\nu} - \partial_{\nu} a_{\mu}) (\partial_{\rho} a_{\sigma} - \partial_{\sigma} a_{\rho}) + \frac{k}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} a_{\mu} \partial_{\nu} a_{\rho},$$

temos que

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_{\lambda}} = \frac{k}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} \delta_{\mu\lambda} \partial_{\nu} a_{\rho} = \frac{k}{4\pi} \epsilon^{\lambda\nu\rho} \partial_{\nu} a_{\rho},$$

e que

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{n} a_{\lambda})} = \frac{k}{4\pi} \epsilon^{\mu\eta\lambda} a_{\mu} - \frac{1}{q^{2}} (\partial^{\eta} a^{\lambda} - \partial^{\lambda} a^{\eta}) = \frac{k}{4\pi} \epsilon^{\mu\eta\lambda} a_{\mu} - \frac{1}{q^{2}} f^{\eta\lambda}.$$

Segue que

$$\frac{k}{4\pi} \epsilon^{\lambda\nu\rho} \partial_{\nu} a_{\rho} = \frac{k}{4\pi} \epsilon^{\mu\eta\lambda} \partial_{\eta} a_{\mu} - \frac{1}{q^2} \partial_{\eta} f^{\eta\lambda},$$

o que resulta na equação

$$\partial_{\mu}f^{\mu\nu} + \frac{kg^2}{4\pi}\epsilon^{\nu\rho\sigma}f_{\rho\sigma} = 0.$$

Com $a_{\mu} = (-a_0, \boldsymbol{a}), \; \boldsymbol{E} = -\nabla a_0 - \partial_t \boldsymbol{a} \in B = \partial_x a_y - \partial_y a_x$, tal equação se divide nas seguintes:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = \frac{kg^2}{2\pi} B,$$

$$\partial_t E_x - \partial_y B = -\frac{kg^2}{2\pi} E_y, \ \partial_t E_y + \partial_x B = \frac{kg^2}{2\pi} E_x.$$

Já podemos identificar uma característica interessante da teoria. A primeira equação sugere que a carga elétrica $Q \propto \int_S \nabla \cdot \boldsymbol{E}$ dentro de uma região S deve ser proporcional ao fluxo magnético $\Phi = \int_S B$. Isto sugere que o fluxo magnético efetivo age como uma espécie de carga elétrica. Para resolver tais equações, note que

$$\partial_t \partial_x E_x - \partial_y \partial_x B = -\frac{kg^2}{2\pi} \partial_x E_y,$$

e que

$$\partial_t \partial_y E_y + \partial_y \partial_x B = \frac{kg^2}{2\pi} \partial_y E_x.$$

Somando as duas equações, temos que

$$\partial_t(\partial_x E_x + \partial_y E_y) = -\frac{kg^2}{2\pi}(\partial_x E_y - \partial_y E_x).$$

Do lado esquerdo, temos $\partial_t \nabla \cdot \boldsymbol{E}$. Logo,

$$\frac{kg^2}{2\pi}\partial_t B = -\frac{kg^2}{2\pi}(\partial_x E_y - \partial_y E_x),$$

i.e.,

$$\partial_t B = -(\partial_x E_y - \partial_y E_x).$$

Agora,

$$\partial_t \partial_y E_x - \partial_y^2 B = -\frac{kg^2}{2\pi} \partial_y E_y,$$

е

$$\partial_t \partial_x E_y + \partial_x^2 B = \frac{kg^2}{2\pi} \partial_x E_x.$$

Subtraindo a primeira equação da segunda, temos que

$$\partial_t (\partial_x E_y - \partial_y E_x) + \nabla^2 B = \frac{kg^2}{2\pi} \nabla \cdot \mathbf{E},$$

i.e.,

$$-\partial_t^2 B + \nabla^2 B = \left(\frac{kg^2}{2\pi}\right)^2 B.$$

Note que, se $g \to 0$, recuperamos a equação da onda, o que é razoável pois o termo de Maxwell se torna dominante. Tentando uma solução do tipo onda de frequência ω e vetor de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, i.e., $B = B_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)}$, obtemos a seguinte relação de disperção:

$$\omega^2 - k_x^2 - k_y^2 = \left(\frac{kg^2}{2\pi}\right)^2.$$

Novamente, se $g \to 0$, obtemos a relação de disperção usual de um fóton, $\omega = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. Em uma aproximação semi-clássica, multiplicando ambos os lados por \hbar^2 e utilizando que $E = \hbar \omega$, $\boldsymbol{p} = \hbar \boldsymbol{k}$, temos

$$E^2 - \boldsymbol{p}^2 = \left(\frac{\hbar k g^2}{2\pi}\right)^2.$$

Comparando com o invariante relativístico $E^2 - \mathbf{p}^2 = m^2$, onde m é a massa de repouso da partícula, segue que a ação de Maxwell-Chern-Simons descreve uma partícula massiva, de massa

$$m = \frac{\hbar k g^2}{2\pi}.$$

Curiosamente, a massa é quantizada em múltiplos de $g^2e^2/2\pi$. No limite $g\to\infty$, quando a ação de Chern-Simons se torna dominante, a massa da partícula diverge. Intuitivamente, a ação de Chern-Simons descreve um "fóton pesado".

Sabendo que tipo de física a ação de Chern-Simons descreve, vamos voltar ao FQHE. Estamos assumindo que os elétrons bidimensionais no FQHE se comportam coletivamente como um campo de $gauge\ U(1)$ em duas dimensões, cuja física é capturada principalmente pela ação de Chern-Simons. Assumimos também que tais graus de liberdade coletivos são importantes para a física de longas distâncias, o que significa que não queremos integrálos fora da função de partição, que é então dada por

$$Z[A_{\mu}] = \int \mathcal{D}a_{\mu}e^{iS_{eff}[a,A]/\hbar}, \qquad (2.6.17)$$

onde A_{μ} continua sendo o campo eletromagnético externo aplicado. É como se tivéssemos integrado os graus de liberdade locais e construído a ação efetiva em termos dos graus de liberdade efetivos a_{μ} , que são dinâmicos. Precisamos agora escrever a ação efetiva S_{eff} .

Para termos uma resposta no sistema influenciada por a_{μ} , temos que acoplar A_{μ} e a_{μ} de alguma forma. Lembre que a corrente J^{μ} se acopla ao campo A_{μ} . Como vimos quando estávamos discutindo a física da ação de Chern-Simons, o fluxo magnético gerado por a_{μ} age como uma espécie de carga elétrica efetiva no nosso sistema. Logo, é razoável definir a seguinte corrente:

$$J^{\mu} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_{\nu} a_{\rho}.$$

A conservação da corrente $\partial_{\mu}J^{\mu}=0$ segue imediatamente da definição de J^{μ} . Assim, o fluxo magnético gerado por a_{μ} equivale à carga elétrica que se

acopla à A_{μ} . De fato, note que

$$\rho = J^0 = \frac{e^2}{2\pi\hbar}(\partial_x a_y - \partial_y a_x) = \frac{e^2}{2\pi\hbar}B,$$

ou seja,

$$Q = \int_{S} \rho = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int_{S} B.$$

Se assumirmos também que o fluxo é quantizado,

$$\frac{1}{2\pi} \int_S B = \frac{\hbar}{e},$$

segue que Q = e é a carga que corresponde ao fluxo de a_{μ} . Sendo assim, vamos considerar a seguinte ação efetiva:

$$S_{eff}[a,A] = \frac{e^2}{\hbar} \int d^3x \left(\frac{1}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} A_{\mu} \partial_{\nu} a_{\rho} - \frac{m}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} a_{\mu} \partial_{\nu} a_{\rho} + \dots \right), \quad (2.6.18)$$

onde m é um número inteiro, o primeiro descreve o acoplamento do campo externo com a corrente, é $A_{\mu}J^{\mu}$, o segundo termo é a ação de Chern-Simons para a_{μ} . Outros termos, como termos de Maxwell para a_{μ} e A_{μ} e um termo de Chern-Simons para A_{μ} são omitidos, pois os primeiros não afetam a física de largas distâncias e o segundo simplesmente gera o IQHE, que já estudamos.

Note que a ação efetiva é quadrática no campo a_{μ} , o que significa que podemos integrar sobre todos os a_{μ} . Para tanto, basta encontrar a solução de sua equação de movimento. Temos que, como

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} A_{\mu} \partial_{\nu} a_{\rho} - \frac{m}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} a_{\mu} \partial_{\nu} a_{\rho},$$

segue que

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_{\alpha}} = \partial_{\beta} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\beta} a_{\alpha})} \right) \Leftrightarrow \frac{m}{2} \epsilon^{\alpha \nu \rho} (\partial_{\rho} a_{\nu} - \partial_{\nu} a_{\rho}) = \epsilon^{\alpha \mu \beta} \partial_{\beta} A_{\mu}.$$

Utilizando a identidade $\epsilon_{\alpha\sigma\eta}\epsilon^{\alpha\nu\rho}=\delta^{\nu}_{\sigma}\delta^{\rho}_{\eta}-\delta^{\nu}_{\eta}\delta^{\rho}_{\sigma}$, segue que

$$m(\partial_{\mu}a_{\nu} - \partial_{\nu}a_{\mu}) = \partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu},$$

cuja solução é $a_{\mu}=A_{\mu}/m$. Substituindo $a_{\mu}=A_{\mu}/m$ na ação efetiva, segue que

$$S_{eff}[A] = \frac{e^2}{\hbar} \int d^3x \left(\frac{1}{2m\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} A_{\mu} \partial_{\nu} A_{\rho} - \frac{1}{4m\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} A_{\mu} \partial_{\nu} A_{\rho} \right),$$

i.e.,

$$S_{eff}[A] = \frac{1}{4\pi} \frac{e^2}{m\hbar} \int d^3x \epsilon^{\mu\nu\rho} A_{\mu} \partial_{\nu} A_{\rho},$$

que é a ação de Chern-Simons para o IQHE com $\nu=1/m$. Segue imediatamente que a condutividade de Hall é dada por

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \frac{1}{m},\tag{2.6.19}$$

que é exatamente a condutividade de Hall fracionária que observamos no FQHE.

Agora, vamos considerar que existe uma corrente emergente j^{μ} , que se acopla minimamente ao campo emergente a_{μ} :

$$\Delta S = \int d^3x a_\mu j^\mu.$$

A corrente j^{μ} descreve as quasi-partículas (quasi-buracos e quasi-elétrons) emergentes do sistema. De fato, note que, adicionando o acoplamento mínimo de a_{μ} com j^{μ} e desligando o campo externo A_{μ} , a ação efetiva é dada por

$$S = -\frac{e^2 m}{4\pi\hbar} \int d^3x \epsilon^{\mu\nu\rho} a_\mu \partial_\nu a_\rho + \int d^3x a_\mu j^\mu.$$

A Lagrangiana do sistema é, então, dada por

$$\mathcal{L} = -\frac{e^2 m}{4\pi\hbar} \epsilon^{\mu\nu\rho} a_{\mu} \partial_{\nu} a_{\rho} + a_{\mu} j^{\mu}.$$

Da equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_{\mu}} = \partial_{\nu} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\nu} a_{\mu})} \right),$$

obtemos a equação de movimento

$$\frac{e^2m}{2\pi\hbar}f_{\mu\nu} = \epsilon_{\alpha\mu\nu}j^{\alpha}.$$

Lembre que os graus de liberdade que se acoplam ao campo eletromagnético externo (definido por A_{μ}) são descritos pela corrente J^{μ} , dada por

$$J^{\mu} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_{\nu} a_{\rho}.$$

Vamos assumir que j^{μ} descreve um grau de liberdade estático $(j^1 = j^2 = 0)$, de carga e (em relação ao campo emergente a_{μ}) e localizado na origem, i.e., $j^0 = e\delta^2(x)$. Da equação de movimento,

$$j^0 = \frac{e^2 m}{2\pi\hbar} f_{12}.$$

Enquanto isso, a carga J^0 (em relação ao campo eletromagnético A_{μ}) do grau de liberdade descrito por a_{μ} é dada por

$$J^0 = \frac{e^2}{2\pi\hbar} f_{12}.$$

Segue então que

$$J^{0} = \frac{1}{m}j^{0} = \frac{e}{m}\delta^{2}(x),$$

isto é, a carga elétrica do grau de liberdade descrito pela corrente de a_{μ} é fracionária, como vimos anteriormente nos estados de Laughlin. Logo, a corrente j^{μ} descreve as quasi-partículas que emergem no sistema.

Perceba também que a equação de movimento também implica que

$$\frac{1}{2\pi}f_{12} = \frac{\hbar}{em}\delta^2(x),$$

isto é, cada quasi-partícula está "presa" a um fluxo magnético de $2\pi\hbar/em$. Ou seja, quando fazemos uma quasi-partícula percorrer um caminho fechado em torno de outra, estamos levando uma carga e ao redor de um fluxo $\Phi = 2\pi\hbar/em$. Sabemos que isso gera uma fase $e^{ie\Phi/\hbar} = e^{2\pi i/m}$. Daí, pela nossa experiência, já podemos concluir que a estatística das partículas é fracionária: sob troca de quasi-partículas, a função de onda do sistema ganha uma fase de $\alpha = 1/m$, como previsto.

Como vimos anteriormente no FQHE, se impusermos condições de fronteira periódicas no plano onde os elétrons se movem, formando assim um toro bidimensional, o estado fundamental do sistema se torna degenerado. A degenerescência depende da topologia da região bidimensional na qual os elétrons vivem. É possível observar tal fenômeno do ponto de vista da teoria efetiva de Chern-Simons. Para tanto, precisamos quantizar a teoria.

Considere a ação de Chern-Simons

$$S_{CS} = \frac{me^2}{4\pi\hbar} \int d^3x \epsilon^{\mu\nu\rho} a_\mu \partial_\nu a_\rho. \tag{2.6.20}$$

Sendo uma teoria de gauge, precisamos fixar um gauge para não haver inconsistências na teoria quântica. Escolhemos o gauge

$$a_0 = 0.$$

A equação de movimento da teoria é dada por

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_{\mu}} = \partial_{\nu} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\nu} a_{\mu})} \right),$$

isto é,

$$f_{\mu\nu} = \partial_{\mu}a_{\nu} - \partial_{\nu}a_{\mu} = 0.$$

Em particular, a equação de movimento para a_0 ,

$$f_{12} = \partial_1 a_2 - \partial_2 a_1 = 0$$

deve ser um vínculo imposto ao campo de gauge. Note que, em notação de formas diferenciais, f=da=0, o que significa que devemos achar campos a fechados. Se a for um campo exato, i.e., a=dw para algum campo escalar w, temos nossa resposta. De fato, como estamos no toro, conseguimos encontrar o campo w integrando a sobre os caminhos não-contráteis no toro:

$$w_i = \oint_{\gamma_i} dx^i a_i,$$

onde γ_i é um dos ciclos não-contráteis do toro. Ou seja, dados quaisquer a_1, a_2 , garantimos que o vínculo será satisfeito se escrevermos a = dw, com w_i dado pela integral dos a_i sobre os ciclos não-contráteis do toro.

No entanto, note que o gauge não foi completamente fixado. Se realizarmos a transformação $a_i \to a_i + (\hbar/e)R_i$, onde R_i é o raio do ciclo não-contrátil γ_i do toro, temos que $w_i \to w_i + 2\pi(\hbar/e)$, e a não é invariante. Tomamos então

$$W_i = e^{iew_i/\hbar},$$

que é invariante sob a transformação sugerida. Como $dW_i = W_i dw_i$, temos que $a = d \log W_i$.

Prosseguindo com a quantização, definimos

$$[a_1(x), \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 a_1(x'))}] = \frac{e^2}{m\hbar^2} [a_1(x), a_2(x')] = 2\pi i \delta^2(x - x'),$$

o que implica que

$$[w_1, w_2] = \frac{2\pi i\hbar^2}{me^2},$$

onde integramos a função delta. Logo, a relação de comutação de W_i é

$$W_1 W_2 = e^{2\pi i/m} W_2 W_1.$$

A menor representação de tal álgebra possui dimensão igual a m, que é exatamente a degenrescência do estado fundamental do FQHE. Em superfícies de gênero g, a teoria de Chern-Simons define m^g estados fundamentais.

3 Quantum Double Models

The formalism of Abelian Higher Gauge Theories generalizes to any spatial dimensions a class of models in (2+1)d called the *Quantum Double Models* (QDM's) (**CITATIONS**). These models can be seen as Hamiltonian formulations of lattice gauge theories in (2+1)d. Before we introduce the general formulation of QDM's with arbitrary finite gauge groups G, let's build intuition by reviewing a standard example: the *Toric Code* (**CITATIONS**).

3.1 Toric Code

Consider a 2-dimensional manifold M discretized by a square lattice K. The lattice K is composed by a set of vertices K_0 , a set of links K_1 and a set of plaquettes K_2 . A spin-1/2 degree of freedom sits at every link $l \in K_1$ of the lattice. That is, there is a local Hilbert space \mathcal{H}_l , for each $l \in K_1$, whose basis is the set $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. The total Hilbert space \mathcal{H} of the system is given by the tensor product

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{l \in K_1} \mathcal{H}_l. \tag{3.1.1}$$

The dynamics of this spin system is governed by the Hamiltonian

$$H = -\sum_{v \in K_0} A_v - \sum_{p \in K_2} B_p, \tag{3.1.2}$$

where, for each vertex $v \in K_0$, the operator $A_v : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ is given by

$$A_v = \bigotimes_{l \in \text{star}(v)} \sigma_l^x, \tag{3.1.3}$$

and, for each plaquette $p \in K_2$, the operator $B_p : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ is given by

$$B_p = \bigotimes_{l \in \partial p} \sigma_l^z. \tag{3.1.4}$$

Before we proceed, let's describe an intuitive way to understand how the Toric Code is related to lattice gauge theories using a familiar model. Consider the *transverse field Ising model* on a 2-dimensional square lattice. It is defined by placing spin-1/2 degrees of freedom at the vertices of the lattice. The Ising Hamiltonian is usually given by

$$H_{Ising} = -J \sum_{\langle v, v' \rangle} \sigma_v^z \sigma_{v'}^z - g \sum_v \sigma^x, \qquad (3.1.5)$$

where J and g are coupling constants (the Ising interaction strength and the transverse magnetic field, respectively). However, it will be convenient for us if we rotate the Pauli operators by $\pi/2$ around the y-axis, which is equivalent to changing $x \leftrightarrow z$. This is an unitary transformation and as such will not change the model's physical properties. Then, let's consider the Hamiltonian

$$H_{Ising} = -J \sum_{\langle v, v' \rangle} \sigma_v^x \sigma_{v'}^x - g \sum_v \sigma_v^z.$$
 (3.1.6)

The Ising model (3.1.6) has a global \mathbb{Z}_2 symmetry, given by the operator

$$U = \bigotimes_{v} \sigma_{v}^{z}. \tag{3.1.7}$$

For J>>g, there are two ground states of the system. They are formed by all spins pointing to the same direction, either +x or -x. Since these states are not symetric under the global \mathbb{Z}_2 symmetry, we say they are symmetry breaking states. If the system is in such a state, we say it is in a symmetry breaking phase. In constrast, for J<< g, the unique ground state of the system is composed by all spins in a superposition of the states $|0\rangle$ and $|1\rangle$. This state is symmetric under the global \mathbb{Z}_2 symmetry. If the system is in such state, we say it is in a symmetric phase.

Note that the system has no $local \mathbb{Z}_2$ symmetry. In particular, the Ising interaction doesn't commute with σ_v^z for any single site v. To construct a model with local symmetry, we need to gauge the \mathbb{Z}_2 symmetry by introducing a \mathbb{Z}_2 gauge field.

Thus, we place spin-1/2 degrees of freedom at the *links* of the square lattice. Pauli operators acting over such spins are denoted as τ_l^{μ} , for any link l and $\mu = x, y, z$. We minimally couple the *matter* degrees of freedom at the vertices to the *gauge field* at the links by changing the Ising interaction as

$$\sigma_v^z \sigma_{v'}^z \to \sigma_v^z \tau_l^z \sigma_{v'}^z, \tag{3.1.8}$$

for any vertices v, v' such that they are nearest neighbors and any link l that connects the two vertices v, v'. This term is now invariant under the local \mathbb{Z}_2 symmetry given by the operator

$$A_v' = \sigma_v^z \bigotimes_{l \in \text{star}(v)} \tau_l^z, \tag{3.1.9}$$

for each vertex v in the lattice.

We constrain the gauge field dynamics in such a way that its flux around a plaquette must be zero. In the continuum limit, this is equivalent to saying that the gauge field is such that there is no magnetic field. Since magnetic field costs energy, this is a reasonable condition. This constraint is enforced by adding to the Hamiltonian the operator

$$B_p = \bigotimes_{l \in \partial p} \tau_l^x. \tag{3.1.10}$$

Thus, the gauged Hamiltonian is given by

$$H_{gauged} = -J \sum_{\langle v, v' \rangle} \sigma_v^z \tau_l^z \sigma_{v'}^z - g \sum_v \sigma_v^z - \sum_p B_p.$$
 (3.1.11)

Now, in the symmetric phase $(J \ll g)$, we can ignore the first term and study the Hamiltonian

$$H_{gauged} = -g \sum_{v} \sigma_v^z - \sum_{p} B_p. \tag{3.1.12}$$

If we also impose that physical states $|\psi\rangle$ must be invariant under the gauge (local) symmetry, we have that

$$\sigma_v^z \bigotimes_{l \in \text{star}(v)} \tau_l^z |\psi\rangle = |\psi\rangle,$$

i.e.,

$$\bigotimes_{l \in \text{star}(v)} \tau_l^z |\psi\rangle = \sigma_v^z |\psi\rangle.$$

Then, in the subspace of physical states, we can replace σ_v^z by $A_v = \bigotimes_{l \in \text{star}(v)} \tau_l^z$. In this subspace, the gauged Hamiltonian is

$$H_{gauged} = -\sum_{v} A_v - \sum_{p} B_p, \qquad (3.1.13)$$

where we set g=1 for convenience. By rotating the link spins by $\pi/2$ around the y axis, we have finally that H_{gauged} is equivalent to the toric code Hamiltonian. Thus, the toric code can be seen as the gauged 2D transverse field Ising model in the symmetric phase constrained to the subspace of locally symmetric states.

A Transformação de Jordan-Wigner

A transformação de Jordan-Wigner nos permite mapear uma cadeia de spins com interações entre vizinhos mais próximos em um modelo de férmions interagentes. Considere um sistema de spins em uma rede unidimensional com N sítios e condições de fronteira periódicas. A transformação de Jordan-Wigner define, para cada sítio i da rede, o operador

$$c_i = \left[\prod_{n=1}^{i-1} (-\sigma_n^z) \right] \sigma_i^-. \tag{A.1}$$

Ou seja, temos um mapa entre a álgebra das matrizes de Pauli e a álgebra dos operadores c_i , que são fermiônicos, isto é,

$$\{c_i, c_i^{\dagger}\} = \delta_{ij}, \tag{A.2}$$

$$\{c_i, c_j\} = \{c_i^{\dagger}, c_j^{\dagger}\} = 0.$$
 (A.3)

De fato, temos que, para i < j,

$$c_i c_j = \left[\prod_{n=1}^{i-1} (-\sigma_n^z) \right] \sigma_i^- \left[\prod_{n=1}^{j-1} (-\sigma_n^z) \right] \sigma_j^-.$$
 (A.4)

Cada σ^z da esquerda aniquila um σ^z da direita até chegar no sítio i, onde teremos o produto $\sigma_i^-(-\sigma_i^z)$. Enquanto isso, no produto

$$c_{j}c_{i} = \left[\prod_{n=1}^{j-1} (-\sigma_{n}^{z})\right] \sigma_{j}^{-} \left[\prod_{n=1}^{i-1} (-\sigma_{n}^{z})\right] \sigma_{i}^{-}, \tag{A.5}$$

acontece a mesma coisa, isto é, cada σ^z da esquerda aniquila um σ^z da direita até chegar no sítio i, onde dessa vez teremos o produto $(-\sigma_i^z)\sigma_i^-$. Como $\sigma^z\sigma^-=-\sigma^-\sigma^z$, a soma $c_ic_j+c_jc_i=0$ e, portanto, $\{c_i,c_j\}=0$ para i< j. Pelo mesmo argumento, pode-se mostrar que o mesmo vale para i> j e, sendo assim, $\{c_i,c_j\}=0$ para todo i,j=1,...,N. Mais ainda, considere o produto

$$c_i c_i^{\dagger} = \left[\prod_{n=1}^{i-1} (-\sigma_n^z) \right] \sigma_i^{-} \left[\prod_{n=1}^{i-1} (-\sigma_n^z) \right] \sigma_i^{+}. \tag{A.6}$$

Todos os operadores σ^z se aniquilam, sobrando no sítio i o produto $\sigma_i^- \sigma_i^+$. Da mesma forma, no produto $c_i^{\dagger} c_i$, o único operador diferente da identidade é o produto $\sigma_i^+ \sigma_i^-$ que age no sítio i. Daí, a soma $\{c_i, c_i^{\dagger}\} = c_i c_i^{\dagger} + c_i^{\dagger} c_i = \sigma_i^- \sigma_i^+ + \sigma_i^+ \sigma_i^-$. Como

$$\sigma^{-} = \left| -1 \right\rangle \left\langle 1 \right|, \sigma^{+} = \left| 1 \right\rangle \left\langle -1 \right|,$$

segue que

$$\{c_i, c_i^{\dagger}\} = |-1\rangle \langle 1|1\rangle \langle -1| + |1\rangle \langle -1| - 1\rangle \langle 1| = 1, \tag{A.7}$$

onde utilizamos a relação de completeza $|-1\rangle\langle -1| + |1\rangle\langle 1| = 1$. Portanto, os operadores c_i definidos pela (A.1) são mesmo fermiônicos.

Conseguimos estabelecer uma relação entre matrizes de Pauli e operadores fermiônicos. Agora precisamos saber como mapear configurações de spin em estados de férmions. O operador c_i^{\dagger} cria um férmion no sítio i, enquanto que c_i aniquila uma partícula em i. O estado sem férmions $|0\rangle$ deve ser tal que c_i $|0\rangle = 0$. Como $\sigma^- = |-1\rangle \langle 1|$, segue que $\sigma^- |-1\rangle = 0$. Logo, da (A.1), podemos ver que o estado de vácuo, aniquilado por c_i para todo i=1,...,N, corresponde à configuração onde todos os spins estão para baixo, i.e.,

$$|0\rangle = |-1, -1, ..., -1\rangle$$
.

Segue que excitações fermiônicas, isto é, estados com um número de férmions diferente de zero, são associados a estados com spins para cima.

Essa relação se torna mais clara considerando o operador

$$\sigma_i^z = 2\sigma_i^+ \sigma_i^- - 1 = 2c_i^{\dagger} c_i - 1.$$

Auto-valores $\sigma_i = \pm 1$ de σ_i^z estão relacionados a auto-valores n_i do operador $N_i = c_i^{\dagger} c_i$, que fornece o número de férmions no sítio i, da seguinte forma:

$$\sigma_i = 2n_i - 1$$

isto é,

$$n_i = \frac{1 + \sigma_i}{2}.\tag{A.8}$$

Como $\sigma_i=\pm 1,\ n_i=1,0$, respeitando o princípio da exclusão de Pauli. Resumindo, um spin para cima no sítio i corresponde à presença de um férmion nessa posição, enquanto que um spin para baixo em i corresponde à ausência de partículas nessa região.

Podemos escrever a (A.1) de diversas formas, sendo uma delas de grande ajuda na hora de inverter a relação, isto é, quando queremos expressar σ^- em termos de c. Para escrevê-la, primeiro notamos que

$$e^{i\pi\sigma_i^+\sigma_i^-} = -\sigma_i^z. \tag{A.9}$$

De fato,

$$e^{i\pi\sigma_i^+\sigma_i^-} = 1 + i\pi\sigma_i^+\sigma_i^- + \frac{1}{2}(i\pi\sigma_i^+\sigma_i^-)^2 + \frac{1}{3!}(i\pi\sigma_i^+\sigma_i^-)^3 + \dots$$
 (A.10)

Como

$$\sigma^{+}\sigma^{-} = |1\rangle \langle -1| |-1\rangle \langle 1| = |1\rangle \langle 1|, \tag{A.11}$$

segue que

$$(\sigma^{+}\sigma^{-})^{2} = (|1\rangle\langle 1|)^{2} = |1\rangle\langle 1| = \sigma^{+}\sigma^{-}. \tag{A.12}$$

Logo,

$$e^{i\pi\sigma_i^+\sigma_i^-} = 1 + (i\pi + \frac{1}{2}(i\pi)^2 + \frac{1}{3!}(i\pi)^3 + \dots)\sigma_i^+\sigma_i^-$$

$$= 1 + (e^{i\pi} - 1)\sigma_i^+\sigma_i^-$$

$$= 1 - 2\sigma_i^+\sigma_i^-$$

$$= -\sigma_i^z.$$

Assim, podemos escrever

$$\prod_{n=1}^{i-1} (-\sigma_n^z) = \prod_{n=1}^{i-1} e^{i\pi\sigma_n^+ \sigma_n^-}, \tag{A.13}$$

e então

$$c_i = \left[\prod_{n=1}^{i-1} e^{i\pi\sigma_n^+\sigma_n^-}\right] \sigma_i^-. \tag{A.14}$$

Agora podemos facilmente inverter a transformação. Temos que

$$(e^{i\pi\sigma_n^+\sigma_n^-})^2 = (-\sigma_n^z)^2 = 1.$$
 (A.15)

Ou seja, multiplicando pela esquerda os dois lados da (A.14) por $\prod_{n=1}^{i-1} e^{i\pi\sigma_n^+\sigma_n^-}$, segue que

$$\sigma_i^- = \left[\prod_{n=1}^{i-1} e^{i\pi\sigma_n^+\sigma_n^-}\right] c_i, \tag{A.16}$$

daí, como $\sigma_i^+\sigma_i^-=c_i^\dagger c_i$, temos finalmente a transformação inversa

$$\sigma_i^- = \left[\prod_{n=1}^{i-1} e^{i\pi c_n^{\dagger} c_n}\right] c_i. \tag{A.17}$$

B Transformação de Bogoljubov

Neste apêndice, vamos mostrar que as transformações (1.4.33) e (1.4.34) preservam a álgebra fermiônica, isto é, os operadores η_k satisfazem as relações

$$\{\eta_k, \eta_k^{\dagger}\} = 1, \ \{\eta_k, \eta_{-k}^{\dagger}\} = 0$$
 (B.1)

$$\{\eta_k, \eta_k\} = \{\eta_k, \eta_{-k}\} = 0,$$
 (B.2)

onde as relações para η_{-k} são obtidas fazendo $k \to -k$ e estabelecendo que $\cos\frac{\theta_{-k}}{2} = \cos\frac{\theta_k}{2}$ e $\sin\frac{\theta_{-k}}{2} = -\sin\frac{\theta_k}{2}$, e as relações para η_k^{\dagger} e η_{-k}^{\dagger} são obtidas tomando o adjunto das equações acima.

Primeiramente, multiplicando os dois lados da (1.4.33) por $\cos(\theta_k/2)$, tomando o adjunto da (1.4.34) e multiplicando seus dois lados por $\sin(\theta_k/2)$ e por fim somando os resultados, temos que

$$\eta_k = \cos\frac{\theta_k}{2}c_k + \sin\frac{\theta_k}{2}c_{-k}^{\dagger}, \tag{B.3}$$

$$\eta_{-k} = \cos\frac{\theta_k}{2}c_{-k} - \sin\frac{\theta_k}{2}c_k^{\dagger},\tag{B.4}$$

onde a segunda equação é obtida da primeira fazendo $k \to -k$. Vamos mostrar a (B.1). Temos que

$$\begin{split} \eta_k \eta_k^\dagger + \eta_k^\dagger \eta_k &= \left(\cos\frac{\theta_k}{2}c_k + \sin\frac{\theta_k}{2}c_{-k}^\dagger\right) \left(\cos\frac{\theta_k}{2}c_k^\dagger + \sin\frac{\theta_k}{2}c_{-k}\right) \\ &+ \left(\cos\frac{\theta_k}{2}c_k^\dagger + \sin\frac{\theta_k}{2}c_{-k}\right) \left(\cos\frac{\theta_k}{2}c_k + \sin\frac{\theta_k}{2}c_{-k}^\dagger\right) \\ &= \cos^2\frac{\theta_k}{2}c_k c_k^\dagger + \cos\frac{\theta_k}{2}\sin\frac{\theta_k}{2}c_k c_{-k} + \cos\frac{\theta_k}{2}\sin\frac{\theta_k}{2}c_{-k}^\dagger c_k^\dagger + \sin^2\frac{\theta_k}{2}c_{-k}^\dagger c_{-k} \\ &+ \cos^2\frac{\theta_k}{2}c_k^\dagger c_k + \cos\frac{\theta_k}{2}\sin\frac{\theta_k}{2}c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2}c_{-k}c_k + \sin^2\frac{\theta_k}{2}c_{-k}c_{-k}^\dagger \\ &= \cos^2\frac{\theta_k}{2}\{c_k, c_k^\dagger\} + \cos\frac{\theta_k}{2}\sin\frac{\theta_k}{2}\left[\{c_k, c_{-k}\} + \{c_k^\dagger, c_{-k}^\dagger\}\right] + \sin^2\frac{\theta_k}{2}\{c_{-k}, c_{-k}^\dagger\} \\ &= \sin^2\frac{\theta_k}{2} + \cos^2\frac{\theta_k}{2} = 1, \end{split}$$

onde utilizamos as relações $\{c_k, c_q^{\dagger}\} = \delta_{kq}$ e $\{c_k, c_q\} = 0$. Mais ainda, temos

que

$$\eta_k \eta_{-k}^{\dagger} + \eta_{-k}^{\dagger} \eta_k = \left(\cos \frac{\theta_k}{2} c_k + \sin \frac{\theta_k}{2} c_{-k}^{\dagger}\right) \left(\cos \frac{\theta_k}{2} c_{-k}^{\dagger} - \sin \frac{\theta_k}{2} c_k\right)$$

$$+ \left(\cos \frac{\theta_k}{2} c_{-k}^{\dagger} - \sin \frac{\theta_k}{2} c_k\right) \left(\cos \frac{\theta_k}{2} c_k + \sin \frac{\theta_k}{2} c_{-k}^{\dagger}\right)$$

$$= \cos^2 \frac{\theta_k}{2} c_k c_{-k}^{\dagger} - \sin^2 \frac{\theta_k}{2} c_{-k}^{\dagger} c_k + \cos^2 \frac{\theta_k}{2} c_{-k}^{\dagger} c_k - \sin^2 \frac{\theta_k}{2} c_k c_{-k}^{\dagger}$$

$$= \left(\cos^2 \frac{\theta_k}{2} - \sin^2 \frac{\theta_k}{2}\right) c_k c_{-k}^{\dagger} + \left(\cos^2 \frac{\theta_k}{2} - \sin^2 \frac{\theta_k}{2}\right) c_{-k}^{\dagger} c_k$$

$$= \cos \theta_k \{c_k, c_{-k}^{\dagger}\} = 0,$$

onde utilizamos que $(c_k)^2 = 0$.

Resta mostrar a (B.2). Temos então que

$$\eta_k \eta_k = \left(\cos\frac{\theta_k}{2}c_k + \sin\frac{\theta_k}{2}c_{-k}^{\dagger}\right) \left(\cos\frac{\theta_k}{2}c_k + \sin\frac{\theta_k}{2}c_{-k}^{\dagger}\right)$$
$$= \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2}\{c_k, c_{-k}^{\dagger}\} = 0,$$

e, finalmente,

$$\eta_k \eta_{-k} + \eta_{-k} \eta_k = \left(\cos\frac{\theta_k}{2}c_k + \sin\frac{\theta_k}{2}c_{-k}^{\dagger}\right) \left(\cos\frac{\theta_k}{2}c_{-k} - \sin\frac{\theta_k}{2}c_k^{\dagger}\right)$$

$$+ \left(\cos\frac{\theta_k}{2}c_{-k} - \sin\frac{\theta_k}{2}c_k^{\dagger}\right) \left(\cos\frac{\theta_k}{2}c_k + \sin\frac{\theta_k}{2}c_{-k}^{\dagger}\right)$$

$$= \cos^2\frac{\theta_k}{2}c_k c_{-k} - \cos\frac{\theta_k}{2}\sin\frac{\theta_k}{2}c_k c_k^{\dagger} + \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2}c_{-k}^{\dagger}c_{-k} - \sin^2\frac{\theta_k}{2}c_{-k}^{\dagger}c_k^{\dagger}$$

$$+ \cos^2\frac{\theta_k}{2}c_{-k}c_k + \cos\frac{\theta_k}{2}\sin\frac{\theta_k}{2}c_{-k}c_{-k}^{\dagger} - \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2}c_k^{\dagger}c_k - \sin^2\frac{\theta_k}{2}c_k^{\dagger}c_{-k}^{\dagger}$$

$$= \cos^2\frac{\theta_k}{2}\{c_k, c_{-k}\} - \cos\frac{\theta_k}{2}\sin\frac{\theta_k}{2}\{c_k, c_k^{\dagger}\}$$

$$+ \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2}\{c_{-k}, c_{-k}^{\dagger}\} - \sin^2\frac{\theta_k}{2}\{c_k^{\dagger}, c_{-k}^{\dagger}\}$$

$$= -\cos\frac{\theta_k}{2}\sin\frac{\theta_k}{2} + \sin\frac{\theta_k}{2}\cos\frac{\theta_k}{2} = 0.$$

C Integrais de Caminhos para Férmions

Aqui, vamos introduzir, de modo geral, a quantização por integrais de caminhos para sistemas fermiônicos. Toda a nossa discussão neste apêndice é baseada na referência [23].

Considere um sistema quântico descrito por um conjunto de 2N operadores fermiônicos $c_i, c_i^{\dagger}, i = 1, ..., N$, que satisfazem as relações de anticomutação

$$\{c_i, c_i^{\dagger}\} = \delta_{ij},\tag{C.1}$$

$$\{c_i, c_j\} = \{c_i^{\dagger}, c_j^{\dagger}\} = 0,$$
 (C.2)

onde c_i^{\dagger} é o adjunto de c_i . Das relações (C.2), segue imediatamente que, para todo i = 1, ..., N,

$$(c_i)^2 = (c_i^{\dagger})^2 = 0.$$
 (C.3)

Isso significa que podemos sempre construir um estado que é aniquilado por todos os c_i 's pela esquerda, ao mesmo tempo em que podemos construir um estado que é aniquilado por todos os c_i^\dagger 's pela direita. Esses estados são dados por

$$|0\rangle = \mathcal{K} \prod_{i=1}^{N} c_i |\psi\rangle,$$
 (C.4)

$$|0\rangle = \mathcal{K} \prod_{i=1}^{N} c_i |\psi\rangle, \qquad (C.4)$$

$$\langle 0| = \mathcal{K}^* \langle \psi| \prod_{i=1}^{N} c_i^{\dagger}, \qquad (C.5)$$

onde \mathcal{K} é uma constante de proporcionalidade e $|\psi\rangle$ é um estado qualquer da base do espaço de Hilbert tal que as expressões acima não sejam identicamente nulas. Note que $\langle 0 |$ é apenas o conjugado hermitiano de $|0 \rangle$. De fato, temos que, para qualquer i,

$$c_i |0\rangle = 0, \tag{C.6}$$

pois podemos anti-comutar c_i com os operadores no produto $\prod_j c_j$ até atingirmos o operador c_i , cujo quadrado é igual a zero. Do mesmo modo,

$$\langle 0 | c_i^{\dagger} = 0. \tag{C.7}$$

Vamos assumir que o estado $|0\rangle$ é único e vamos escolher a constante \mathcal{K} de modo que

$$\langle 0|0\rangle = 1. \tag{C.8}$$

A partir do estado de vácuo, podemos construir uma base completa formada por estados do tipo

$$|i, j, k, ...\rangle = c_i^{\dagger} c_j^{\dagger} c_k^{\dagger} ... |0\rangle,$$
 (C.9)

anti-simétricos nos índices i, j, k, ..., devido às relações (C.2), e tais que $i \neq j \neq k \neq ...$ Esses estados satisfazem

$$c_i^{\dagger} | j, k, \ldots \rangle = | i, j, k, \ldots \rangle,$$
 (C.10)

$$c_i |j, k, \ldots\rangle = 0. \tag{C.11}$$

De fato, a primeira relação é óbvia, enquanto que a segunda deve-se ao fato de que podemos anti-comutar c_i com todos os c^{\dagger} até atingirmos o estado de vácuo $|0\rangle$. Também temos que

$$c_i^{\dagger} | i, j, k, \ldots \rangle = 0, \tag{C.12}$$

$$c_i |i, j, k, \ldots\rangle = |j, k, \ldots\rangle.$$
 (C.13)

Ou seja, c_i^{\dagger} cria uma excitação fermiônica parametrizada pelo índice i, um número quântico que pode representar uma posição numa rede, um número de onda ou até mesmo valores contínuos de posição e momento, enquanto que c_i aniquila uma excitação fermiônica parametrizada por i. Note que duas excitações não podem ter o mesmo número quântico. A base dual pode ser obtida tomando o conjugado hermitiano da (C.9) e é dada por

$$\langle i, j, k, \dots | = \langle 0 | \dots c_k c_j c_i. \tag{C.14}$$

Utilizando a interpretação de que c^{\dagger} e c são operadores de criação e aniquilação de excitações, respectivamente, segue imediatamente que

$$\langle i', j', k', \dots | i, j, k, \dots \rangle = \delta_{i'i} \delta_{j'j} \delta_{k'k} \dots, \tag{C.15}$$

o que pode ser obtido diretamente das definições utilizando a álgebra dos operadores.

Para escrever integrais de caminho, precisamos encontrar auto-estados dos operadores c_i e c_i^{\dagger} . Suponha que $|\xi\rangle$ seja um auto-estado simultâneo de c_i para todo i=1,...,N, isto é,

$$c_i |\xi\rangle = \xi_i |\xi\rangle, \forall i.$$
 (C.16)

Da (C.2), segue que

$$c_i c_i |\xi\rangle + c_i c_i |\xi\rangle = 0 \Leftrightarrow \xi_i \xi_i = -\xi_i \xi_i,$$
 (C.17)

ou seja, os auto-valores ξ_i , para todo i, não podem ser números complexos usuais, isto é, devem ser variáveis que anti-comutam. Mais ainda, deve ser possível multiplicar essas variáveis por números complexos. O que queremos, então, é uma álgebra complexa gerada por elementos que anti-comutam. Por

causa disso, vamos tomar o conjunto $\{\xi_i\}$, i=1,...,N, como sendo elementos geradores de uma álgebra de Grassmann, i.e., variáveis tais que a (C.17) é satisfeita.

É natural que devemos introduzir um objeto matemático dessa natureza para descrever férmions. Para ver isso, considere o campo de Dirac em 3+1 dimensões, $\psi(x^{\mu})$, que deve satisfazer a relação de anti-comutação

$$\{\psi_a(x'), \psi_b^{\dagger}(x)\} = \hbar \delta^3(x' - x)\delta_{ab},$$

para tempos iguais, onde a,b são índices spinoriais. No limite clássico $\hbar \to 0$, o próprio campo anti-comuta, e portanto deve assumir valores em uma álgebra de Grassmann. No entanto, os observáveis da teoria de Dirac são obtidos tomando produtos de um número par de campos de Dirac e seu adjunto, como por exemplo a corrente conservada $\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi$, onde γ^{μ} são as matrizes de Dirac e $\bar{\psi}=\psi^{\dagger}\gamma^{0}$, o que significa que seus valores esperados são números complexos usuais, que comutam. Ou seja, a introdução de variáveis de Grassmann não gera efeitos observáveis, servindo apenas como uma maneira relativamente fácil de levar em conta a natureza fermiônica dos campos na hora de realizar cálculos.

Dito isso, vamos estabelecer algumas propriedades das variáveis de Grassmann, que serão necessárias daqui por diante (para mais detalhes, consulte a referência [24]). Primeiramente, vamos denotar por \mathcal{G}_N a álgebra de Grassmann gerada por $\{\xi_i\}_{i=1}^N$. Como espaço vetorial, sua base é dada pelo conjunto de monômios

$$1, \xi_1, ..., \xi_N, \xi_1 \xi_2, ..., \xi_{N-1} \xi_N, ..., \xi_1 ... \xi_N,$$

e então \mathcal{G}_N possui dimensão dim $\mathcal{G}_N=2^N$. De fato, como cada ξ_i é nilpotente, um produto não-nulo de elementos da álgebra deve conter cada gerador no máximo uma vez. Assim, em cada posição i=1,...,N, temos a opção de colocar uma variável ou não. Portanto, o número de monômios que podemos construir é igual a 2^N . Um elemento arbitrário $f(\xi_1,...,\xi_N) \in \mathcal{G}_N$ é dado por uma combinação linear dos monômios geradores

$$f(\xi_1, ..., \xi_N) = a_0 + \sum_k a_k \xi_k + \sum_{k_i} a_{k_1 k_2} \xi_{k_1} \xi_{k_2} + ... + a_{1...N} \xi_1 ... \xi_N,$$

onde os coeficientes $a_0, a_k, ..., a_{1...N}$ são números complexos. Note que existe uma ambiguidade de sinais na definição dessas combinações lineares. Considere $f(\xi_1, \xi_2) = a_{12}\xi_1\xi_2$. Como $\xi_1\xi_2 = -\xi_2\xi_1$, poderíamos definir a mesma função de forma diferente, anti-comutando as duas variáveis. Para evitar isso, é comum tomar os coeficientes da expansão como sendo antissimétricos

em todos os índices. Com isso, por exemplo, $a_{12}\xi_1\xi_2 = -a_{12}\xi_2\xi_1 = a_{21}\xi_2\xi_1$, pois $a_{12} = -a_{21}$.

Definimos a derivada pela esquerda de elementos da álgebra de Grassmann como uma transformação linear $\frac{\partial}{\partial \xi_k} : \mathcal{G}_N \to \mathcal{G}_N$, cuja ação em elementos da base é dada por

$$\frac{\partial}{\partial \xi_k} \xi_{i_1} \dots \xi_{i_s} = \delta_{i_1 k} \xi_{i_2} \dots \xi_{i_s} - \delta_{i_2 k} \xi_{i_1} \dots \xi_{i_s} + \dots + (-1)^{s-1} \delta_{i_s k} \xi_{i_1} \dots \xi_{i_{s-1}}. \quad (C.18)$$

Em particular,

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \xi_i = \delta_{ij},\tag{C.19}$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_k} \xi_i \xi_j = \delta_{ik} \xi_j - \delta_{jk} \xi_i, \tag{C.20}$$

ou seja, para calcular a derivada pela esquerda de $\xi_{i_1}...\xi_{i_s}$ com relação a ξ_k , é como se utilizássemos a regra do produto para derivadas usuais, mas sempre deixando o símbolo de derivada à esquerda de todo o produto e permutando as variáveis, de modo a posicioná-las à sua frente.

Podemos também definir uma derivada pela direita na álgebra, uma transformação linear $\frac{\partial}{\partial \xi_k}: \mathcal{G}_N \to \mathcal{G}_N$ cuja ação nos geradores é definida como

$$\xi_{i_1}...\xi_{i_s}\frac{\partial}{\partial \xi_k} = \delta_{i_s k} \xi_{i_1}...\xi_{i_{s-1}} - \delta_{i_{s-1} k} \xi_{i_1}...\xi_{i_s} + ... + (-1)^{s-1} \delta_{i_1 k} \xi_{i_2}...\xi_{i_s}. \quad (C.21)$$

Note que a ação desse operador é análoga ao da (C.18), a única diferença é que agora a transformação é aplicada da direita para a esquerda. Por causa dessa semelhança, utilizamos o mesmo símbolo para as duas operações. As regras de derivação usuais, como a regra do produto e a regra da cadeia, se aplicam aqui também.

É possível definir uma função $\chi(t)$ de um parâmetro real t que toma valores na álgebra de Grassmann do seguinte modo:

$$\chi(t) = \sum_{k} a_k(t)\xi_k,$$

onde ξ_k são os geradores da álgebra. Ou seja, a dependência no parâmetro t está nos coeficientes da expansão de χ na base de \mathcal{G}_N . Assim, para cada t, temos um elemento $\chi = \chi(t) \in \mathcal{G}_N$. Desse modo, vemos que podemos tomar a derivada de χ com relação ao parâmetro t da forma usual, i.e.,

$$\dot{\chi}(t) = \frac{d}{dt}\chi(t) = \sum_{k} \frac{d}{dt} a_k(t) \xi_k = \sum_{k} \dot{a}_k(t) \xi_k. \tag{C.22}$$

Agora, vamos definir o conceito de *integração* de variáveis de Grassmann. A integral de Riemann usual possui certas propriedades que gostaríamos de manter, como a linearidade, i.e.,

$$\int dx(a+bf(x)) = a \int dx + b \int dx f(x),$$

e a invariância por translações, i.e.,

$$\int dx f(x+y) = \int dx f(x).$$

Vamos definir então a integral de Berezin como a transformação linear \int : $\mathcal{G}_N \to \mathcal{G}_N$ tal que a invariância por translações é satisfeita. Como uma função arbitrária $f(\xi)$ de uma variável de Grassmann é, no máximo, linear, temos que

$$\int d\xi f(\xi) = a \int d\xi + b \int d\xi \xi,$$

onde a e b são números complexos. A invariância por translações implica que

$$\int d\xi f(\xi + \eta) - \int d\xi f(\xi) = \int d\xi (a + b(\xi + \eta)) - \int d\xi (a + b\xi)$$
$$= b \left(\int d\xi \right) \eta = 0,$$

 $\forall b, \eta$, o que significa que

$$\int d\xi = 0, \tag{C.23}$$

e convencionamos que

$$\int d\xi \xi = 1. \tag{C.24}$$

Para várias variáveis, se $f(\xi) = \prod_i \xi_i c + \text{termos com menos fatores de } \xi$, onde c é uma constante complexa, temos que

$$\int \prod_{i} d\xi_{i} f(\xi) = c, \tag{C.25}$$

onde o produto $\prod_i d\xi$ é organizado de forma a ter a ordem contrária à do produto das variáveis em $f(\xi)$. Por exemplo, se $f(\xi) = \xi_1 \xi_2$, as diferenciais apareceriam na integral na ordem $d\xi_2 d\xi_1$. Como o produto $\xi_1 \xi_2$ é antissimétrico sob a troca $1 \leftrightarrow 2$, para manter a integral simétrica e bem definida, é

necessário que o produto $d\xi_2 d\xi_1$ também seja antissimétrico. Logo, os símbolos $d\xi_i$, i=1,...,N, que fazem o papel de "diferenciais", anti-comutam:

$$\{d\xi_i, d\xi_j\} = 0. \tag{C.26}$$

Como exemplo, vamos integrar a função $f(\xi_1, \xi_2) = a_0 + a_1 \xi_1 + a_2 \xi_2 + a_{12} \xi_1 \xi_2$. Temos que

$$\int d\xi_1 f(\xi_1, \xi_2) = a_1 + a_{12}\xi_2, \tag{C.27}$$

$$\int d\xi_2 f(\xi_1, \xi_2) = a_2 - a_{12}\xi_1, \tag{C.28}$$

$$\int d\xi_2 d\xi_1 f(\xi_1, \xi_2) = a_{12}, \tag{C.29}$$

onde utilizamos apenas a linearidade e as equações (C.23) e (C.24). A integral dupla é realiza por iteração, i.e.,

$$\int d\xi_2 d\xi_1 f(\xi_1, \xi_2) = \int d\xi_2 \left[\int d\xi_1 f(\xi_1, \xi_2) \right],$$

o que pode ser utilizado para calcular integrais sobre qualquer número de variáveis.

Vamos finalizar essa digressão apontando uma situação curiosa. Considere a integral $\int d\xi_1 \xi_1 \xi_2$. Seu resultado é facilmente obtido da (C.24), isto é,

$$\int d\xi_1 \xi_1 \xi_2 = \xi_2.$$

No entanto, se temos a integral $\int d\xi_1 \xi_2 \xi_1$, devemos que proceder da seguinte forma:

$$\int d\xi_1 \xi_2 \xi_1 = -\int d\xi_1 \xi_1 \xi_2 = -\xi_2.$$

Para evitar esse tipo de coisa, vamos assumir que as "diferenciais" anticomutam com todas as variáveis de Grassmann, i.e.,

$$\{\xi_i', d\xi_j\} = 0. \tag{C.30}$$

Com isso,

$$\int \xi_2 d\xi_1 \xi_1 = \xi_2 = \xi_2 \int d\xi_1 \xi_1,$$

o que faz mais sentido visualmente.

Voltando aos operadores fermiônicos, exigimos que

$$\{\xi_i, \xi_j'\} = \{\xi_i, c_j\} = \{\xi_i, c_j^{\dagger}\} = 0,$$
 (C.31)

 $\forall i, j$. Utilizando essas variáveis, temos que auto-estados de c_i são dados por

$$|\xi\rangle = e^{\sum_i c_i^{\dagger} \xi_i} |0\rangle.$$
 (C.32)

De fato, primeiramente temos que

$$[c_i^{\dagger}\xi_i, c_i^{\dagger}\xi_i] = 0,$$

pois realizamos um número par de anti-comutações para transformar $c_j^{\dagger}\xi_jc_i^{\dagger}\xi_i$ em $c_i^{\dagger}\xi_ic_j^{\dagger}\xi_j$. Com isso, temos que

$$(c_i - \xi_i) |\xi\rangle = (c_i - \xi_i) e^{\sum_i c_i^{\dagger} \xi_i} |0\rangle$$
$$= (c_i - \xi_i) e^{c_i^{\dagger} \xi_i} e^{\sum_{j \neq i} c_j^{\dagger} \xi_j} |0\rangle.$$

Da (C.17), segue que $\xi_i^2=0$ para todo i. A (C.3) e a (C.31), então, implicam que

$$(c_i^{\dagger}\xi_i)^2 = c_i^{\dagger}\xi_i c_i^{\dagger}\xi_i = -(c_i^{\dagger})^2 \xi_i^2 = 0,$$

e, portanto,

$$e^{c_i^{\dagger}\xi_i} = 1 + c_i^{\dagger}\xi_i + \frac{1}{2}(c_i^{\dagger}\xi_i)^2 + \dots = 1 + c_i^{\dagger}\xi_i.$$

Daí,

$$(c_{i} - \xi_{i})e^{c_{i}^{\dagger}\xi_{i}} = (c_{i} - \xi_{i})(1 + c_{i}^{\dagger}\xi_{i})$$

$$= c_{i} + c_{i}c_{i}^{\dagger}\xi_{i} - \xi - \xi_{i}c_{i}^{\dagger}\xi_{i}$$

$$= c_{i} + (1 - c_{i}^{\dagger}c_{i})\xi_{i} - \xi_{i} + c_{i}^{\dagger}\xi_{i}^{2}$$

$$= c_{i} - c_{i}^{\dagger}c_{i}\xi_{i}$$

$$= (1 + c_{i}^{\dagger}\xi_{i})c_{i},$$

ou seja, anti-comutando c_i com a exponencial, segue que

$$(c_i - \xi_i) |\xi\rangle = (1 + c_i^{\dagger} \xi_i) c_i e^{\sum_{j \neq i} c_j^{\dagger} \xi_j} |0\rangle$$
$$= (1 + c_i^{\dagger} \xi_i) e^{\sum_{j \neq i} c_j^{\dagger} \xi_j} c_i |0\rangle = 0.$$

Podemos definir também auto-estados de c_i pela esquerda (que não são adjuntos de $|\xi\rangle$) como sendo

$$\langle \xi | = \langle 0 | \left(\prod_{i} c_i \right) e^{-\sum_{i} c_i^{\dagger} \xi_i}.$$
 (C.33)

De fato,

$$\langle \xi | (c_i - \xi_i) = \langle 0 | \left(\prod_i c_i \right) e^{-\sum_i c_i^{\dagger} \xi_i} (c_i - \xi_i)$$

$$= \langle 0 | \left(\prod_i c_i \right) e^{-\sum_{j \neq i} c_j^{\dagger} \xi_j} e^{-c_i^{\dagger} \xi_i} (c_i - \xi_i)$$

$$= \langle 0 | \left(\prod_i c_i \right) e^{-\sum_{j \neq i} c_j^{\dagger} \xi_j} (1 - c_i^{\dagger} \xi_i) (c_i - \xi_i)$$

$$= \langle 0 | \left(\prod_i c_i \right) e^{-\sum_{j \neq i} c_j^{\dagger} \xi_j} c_i (1 - c_i^{\dagger} \xi_i)$$

$$= \langle 0 | \left(c_1 c_2 ... c_i ... c_N \right) c_i e^{-\sum_i c_i^{\dagger} \xi_i} = 0,$$

onde, lembrando que $(c_i)^2 = 0$, anti-comutamos c_i com os operadores do produto até atingirmos c_i . Ou seja,

$$\langle \xi | c_i = \langle \xi | \xi_i. \tag{C.34}$$

Vamos calcular o produto interno entre esses dois auto-estados. Temos que

$$\begin{split} \langle \xi' | \xi \rangle &= \langle 0 | \left(\prod_i c_i \right) e^{-\sum_i c_i^\dagger \xi_i'} e^{\sum_i c_i^\dagger \xi_i} \, | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \left(\prod_i c_i \right) e^{-\sum_i c_i^\dagger (\xi_i' - \xi_i)} \, | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \left(\prod_i c_i \right) \prod_j \left[1 - c_j^\dagger (\xi_j' - \xi_j) \right] \, | 0 \rangle \, . \end{split}$$

Como todas as exponenciais comutam entre si, podemos escrever

$$\left(\prod_{i} c_{i}\right) \prod_{j} \left[1 - c_{j}^{\dagger}(\xi_{j}' - \xi_{j})\right] = c_{1}...c_{N}(1 - c_{N}^{\dagger}(\xi_{N}' - \xi_{N}))...(1 - c_{1}^{\dagger}(\xi_{1}' - \xi_{1})),$$

e, sendo

$$c_N(1 - c_N^{\dagger}(\xi_N' - \xi_N)) = c_N - (1 - c_N^{\dagger}c_N)(\xi_N' - \xi_N)$$

= $-(\xi_N' - \xi_N) + (1 - c_N^{\dagger}(\xi_N' - \xi_N))c_N$,

podemos anti-comutar c_N com todas as outras exponenciais da direita até aniquilar o vácuo $|0\rangle$. Resta então o termo $(\xi_N - \xi'_N)$, que podemos anti-comutar com todas as exponenciais da direita até que ele saia do produto escalar. Temos então que

$$\langle \xi' | \xi \rangle = \langle 0 | c_1 ... c_{N-1} (1 - c_{N-1}^{\dagger} (\xi'_{N-1} - \xi_{N-1})) ... (1 - c_1^{\dagger} (\xi'_1 - \xi_1)) | 0 \rangle (\xi_N - \xi'_N),$$

e podemos manipular o termo $c_{N-1}(1-c_{N-1}^{\dagger}(\xi_{N-1}'-\xi_{N-1}))$ do mesmo modo que fizemos anteriormente. Esta manipulação resultará em um termo $(\xi_{N-1}-\xi_{N-1}')$. Assim, podemos perceber que cada termo $c_i(1-c_i^{\dagger}(\xi_N'-\xi_N))$ resulta em um fator $(\xi_i-\xi_i')$, e portanto o produto escalar é dado por

$$\langle \xi' | \xi \rangle = \prod_{i=1}^{N} (\xi_i - \xi_i'). \tag{C.35}$$

Dos estados (C.32) e (C.33), podemos construir auto-estados de c_i^{\dagger} pela direita e pela esquerda,

$$c_i^{\dagger} | \eta \rangle = \eta_i | \eta \rangle ,$$
 (C.36)

$$\langle \eta | c_i^{\dagger} = \langle \eta | \eta_i,$$
 (C.37)

simplesmente tomando o adjunto das equações (C.16) e (C.34). Assim, temos que $|\eta\rangle$ é o adjunto de $|\xi\rangle$ e $|\eta\rangle$ e o adjunto de $|\xi\rangle$ e, portanto,

$$|\eta\rangle = e^{-\sum_{i} c_{i} \eta_{i}} \left(\prod_{i} c_{i}^{\dagger}\right) |0\rangle,$$
 (C.38)

$$\langle \eta | = \langle 0 | e^{\sum_{i} c_{i} \eta_{i}}. \tag{C.39}$$

A partir dessa construção, alguém pode ser tentado a tomar os autovalores $\eta_i = \bar{\xi}_i$, o complexo conjugado de ξ_i . No entanto, aqui consideraremos que as variáveis η_i são independentes de ξ_i , uma situação equivalente ao que encontramos na teoria conforme de campos, onde tomamos como coordenadas independentes no plano complexo o par (z, \bar{z}) e, no final das contas, fazemos a identificação entre \bar{z} e o complexo conjugado de z.

O produto escalar entre $\langle \eta' | e | \eta \rangle$ é dado por

$$\langle \eta' | \eta \rangle = \langle 0 | e^{\sum_{i} c_{i} \eta'_{i}} e^{-\sum_{i} c_{i} \eta_{i}} \left(\prod_{i} c_{i}^{\dagger} \right) | 0 \rangle$$
$$= \langle 0 | e^{\sum_{i} c_{i} (\eta'_{i} - \eta_{i})} \left(\prod_{i} c_{i}^{\dagger} \right) | 0 \rangle.$$

Prosseguindo do mesmo modo que fizemos para encontrar $\langle \xi' | \xi \rangle$, mas agora movendo c_i^{\dagger} para a esquerda até aniquilar o vácuo $|0\rangle$, temos como resultado

$$\langle \eta' | \eta \rangle = \prod_{i=1}^{N} (\eta_i' - \eta_i).$$
 (C.40)

O produto escalar entre $\langle \xi | e | \eta \rangle$ é dado por

$$\langle \xi | \eta \rangle = \langle \xi | e^{-\sum_{i} c_{i} \eta_{i}} \left(\prod_{i} c_{i}^{\dagger} \right) | 0 \rangle$$

$$= e^{-\sum_{i} \xi_{i} \eta_{i}} \langle \xi | \left(\prod_{i} c_{i}^{\dagger} \right) | 0 \rangle$$

$$= e^{-\sum_{i} \xi_{i} \eta_{i}} \langle 0 | \left(\prod_{i} c_{i} \right) e^{-\sum_{i} c_{i}^{\dagger} \xi_{i}} \left(\prod_{i} c_{i}^{\dagger} \right) | 0 \rangle.$$

Como

$$e^{-\sum_{i} c_{i}^{\dagger} \xi_{i}} \left(\prod_{i} c_{i}^{\dagger} \right) = \prod_{i} (1 - c_{i}^{\dagger} \xi_{i}) \prod_{j} c_{j}^{\dagger}$$
$$= (1 - c_{N}^{\dagger} \xi_{N}) \dots (1 - c_{1}^{\dagger} \xi_{1}) c_{1}^{\dagger} \dots c_{N}^{\dagger}$$

e como

$$(1 - c_i^{\dagger} \xi_i) c_i^{\dagger} = c_i^{\dagger} + \xi_i (c_i^{\dagger})^2 = c_i^{\dagger},$$

segue que

$$e^{-\sum_i c_i^{\dagger} \xi_i} \left(\prod_i c_i^{\dagger} \right) = \prod_i c_i^{\dagger},$$

e daí,

$$\langle \xi | \eta \rangle = e^{-\sum_i \xi_i \eta_i} \langle 0 | \left(\prod_i c_i \right) \left(\prod_i c_i^{\dagger} \right) | 0 \rangle.$$

Anti-comutando todos os c_i^{\dagger} até que a ordem do produto passe de $c_1^{\dagger}...c_N^{\dagger}$ para $c_N^{\dagger}...c_1^{\dagger}$, ganhamos um fator de $(-1)^{N(N-1)/2}$, pois permutando c_N^{\dagger} até a primeira posição ganhamos uma fase de $(-1)^{N-1}$, permutando c_{N-1}^{\dagger} até a segunda posição ganhamos uma fase de $(-1)^{N-2}$ e assim por diante. Temos então que

$$\langle \xi | \eta \rangle = (-1)^{N(N-1)/2} e^{-\sum_i \xi_i \eta_i} \langle 0 | c_1 ... c_N c_N^{\dagger} ... c_1^{\dagger} | 0 \rangle.$$

Agora, como $c_N c_N^{\dagger} = 1 - c_N^{\dagger} c_N$, podemos anti-comutar c_N até chegar no ket $|0\rangle$, aniquilando-o. Fazendo o mesmo procedimento com todos os pares $c_i c_i^{\dagger}$, temos finalmente que

$$\langle \xi | \eta \rangle = (-1)^{N(N-1)/2} e^{-\sum_i \xi_i \eta_i}. \tag{C.41}$$

Do mesmo modo, o produto escalar $\langle \eta | \xi \rangle$ é dado por

$$\langle \eta | \xi \rangle = \langle 0 | e^{-\sum_i \eta_i c_i} | \xi \rangle = e^{-\sum_i \eta_i \xi_i} \langle 0 | \xi \rangle.$$

Como $\langle 0 | c_i^{\dagger} = 0,$

$$\langle 0|\xi\rangle = \langle 0|e^{\sum_i c_i^{\dagger} \xi_i}|0\rangle = 1,$$

e segue que

$$\langle \eta | \xi \rangle = e^{-\sum_i \eta_i \xi_i}. \tag{C.42}$$

Agora, vamos utilizar a noção de integral de Berezin para encontrar uma espécie de relação de completeza para os auto-estados de c_i . Note que, expandindo a exponencial na (C.32), temos que

$$|\xi\rangle = (1 + c_1^{\dagger} \xi_1)(1 + c_2^{\dagger} \xi_2)...(1 + c_N^{\dagger} \xi_N) |0\rangle$$
$$= |0\rangle - \sum_{i=1}^{N} \xi_i |i\rangle - \sum_{i,j=1}^{N} \xi_i \xi_j |ij\rangle + ...$$

onde utilizamos a (C.9). Logo, os estados da base completa (C.9) são coeficientes que acompanham as variáveis de Grassmann no estado coerente $|\xi\rangle$. Então, aplicando a integral de Berezin em $|\xi\rangle$, obtemos os estados da base. Isso significa que qualquer estado $|\psi\rangle$, podendo ser expresso como uma combinação linear dos estados $|i,j,k,...\rangle$, também pode ser escrito como a integral de Berezin do estado coerente $|\xi\rangle$ multiplicado por alguma função que faça com que o resultado seja a combinação linear correta dos estados da base. Escrevemos, então,

$$|\psi\rangle = \int \prod_{i=1}^{N} d\xi_i |\xi\rangle \,\psi(\xi) = \int |\xi\rangle \prod_{i=1}^{N} d\xi_i \psi(\xi), \tag{C.43}$$

onde a permutação do estado coerente com as diferenciais sem o aparecimento de fases é possível porque a exponencial em (C.32) depende apenas de números pares de variáveis fermiônicas. Para determinar a função $\psi(\xi)$, vamos aplicar $\langle \xi' |$ na (C.43), onde ξ' é um auto-valor fixo de c_i . Temos que

$$\langle \xi' | \psi \rangle = \int \langle \xi' | \xi \rangle \prod_{i=1}^{N} d\xi_i' \psi(\xi),$$

onde utilizamos a linearidade da integral de Berezin. Da (C.35), segue que

$$\langle \xi' | \psi \rangle = \int \prod_{i=1}^{N} (\xi_i - \xi_i') \prod_{i=1}^{N} d\xi_i \psi(\xi) = (-1)^N \int \prod_{i=1}^{N} d\xi_i \prod_{i=1}^{N} (\xi_i - \xi_i') \psi(\xi),$$

onde a permutação dos fatores $(\xi - \xi')$ com as diferenciais $d\xi$ dá origem ao fator $(-1)^N$. Considere por um momento o caso em que N=1. Como $\psi(\xi)$ é no máximo linear em ξ , temos que

$$(\xi - \xi')\psi(\xi) = (\xi - \xi')\psi(\xi' + (\xi - \xi'))$$

= $(\xi - \xi')(a + b(\xi' + (\xi - \xi')))$
= $(\xi - \xi')(a + b\xi') = (\xi - \xi')\psi(\xi'),$

onde $a,b\in\mathbb{C}.$ Logo, para N variáveis, segue que

$$\prod_{i=1}^{N} (\xi_i - \xi_i') \psi(\xi) = \prod_{i=1}^{N} (\xi_i - \xi_i') \psi(\xi'),$$

e então

$$\langle \xi' | \psi \rangle = (-1)^N \left[\int \prod_{i=1}^N d\xi_i \prod_{i=1}^N (\xi_i - \xi_i') \right] \psi(\xi').$$

Como a integral de Berezin é invariante por translações,

$$\langle \xi' | \psi \rangle = (-1)^N \left[\int \prod_{i=1}^N d\xi_i \prod_{i=1}^N \xi_i \right] \psi(\xi'),$$

e, da (C.24), segue que

$$\int \prod_{i=1}^{N} d\xi_i \prod_{i=1}^{N} \xi_i = 1.$$

Logo,

$$\langle \xi' | \psi \rangle = (-1)^N \psi(\xi'),$$
 (C.44)

e segue que

$$|\psi\rangle = (-1)^N \int |\xi\rangle \prod_{i=1}^N d\xi_i \langle \xi | \psi \rangle,$$
 (C.45)

ou, como uma equação de operadores,

$$1 = \int |\xi\rangle \prod_{i=1}^{N} (-d\xi_i) \langle \xi|, \qquad (C.46)$$

portanto temos uma espécia de relação de completeza entre esses estados. No entanto, é importante manter em mente que o conjunto de estados coerentes é sobre-completo. Analogamente para os auto-estados de c_i^{\dagger} , temos que qualquer vetor $|\psi\rangle$ pode ser escrito como

$$|\phi\rangle = \int |\eta\rangle \prod_{i=1}^{N} d\eta_i \phi(\eta).$$
 (C.47)

Daí, utilizando a (C.40), temos que para qualquer $|\eta'\rangle$ fixo,

$$\langle \eta' | \phi \rangle = \int \prod_{i=1}^{N} (\eta_i' - \eta) \prod_{i=1}^{N} d\eta_i \phi(\eta) = \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_i \prod_{i=1}^{N} (\eta_i - \eta_i') \phi(\eta),$$

onde utilizamos que

$$\prod_{i=1}^{N} (\eta_i' - \eta_i) = (-1)^N \prod_{i=1}^{N} (\eta_i - \eta_i').$$

A partir daqui, a análise segue de modo exatamente igual ao caso anterior, e temos como resultado a relação

$$1 = \int |\eta\rangle \prod_{i=1}^{N} d\eta_i \langle \eta|. \tag{C.48}$$

Agora estamos em posição de encontrar elementos de matrizes de transição. Consideramos que o sistema é descrito por uma Hamiltoniana $H=H(c^{\dagger},c)$ com ordenamento normal, isto é, em todos os produtos, posicionamos os operadores de aniquilação c_i à direita dos de criação c_i^{\dagger} . Consideramos também que todos os produtos na Hamiltoniana envolvem um número par de operadores, para que não reste nenhuma variável anti-comutativa (lembre-se que observáveis devem ser números complexos usuais). Com isso em mente, definimos os operadores dependentes do tempo

$$c_i(t) = e^{iHt}c_i e^{-iHt}, (C.49)$$

$$c_i^{\dagger}(t) = e^{iHt}c_i^{\dagger}e^{-iHt},\tag{C.50}$$

cujos auto-estados dependentes do tempo são

$$|\xi, t\rangle = e^{iHt} |\xi\rangle, \ \langle \xi, t| = \langle \xi| e^{-iHt},$$
 (C.51)

$$|\eta, t\rangle = e^{iHt} |\eta\rangle, \ \langle \eta, t| = \langle \eta| e^{-iHt}.$$
 (C.52)

De fato,

$$c_i(t) |\xi, t\rangle = e^{iHt} c_i e^{-iHt} e^{iHt} |\xi\rangle = e^{iHt} c_i |\xi\rangle = \xi e^{iHt} |\xi\rangle = \xi |\xi, t\rangle$$

e assim por diante. Se o sistema está no estado $|\xi,t\rangle$ no tempo t, a amplitude de, passado um intervalo de tempo infinitesimal $d\tau$, encontrá-lo no estado $|\xi',t+d\tau\rangle$ é dada por

$$\langle \xi', t + d\tau | \xi, t \rangle = \langle \xi' | e^{-iH(t+d\tau)} e^{iHt} | \xi \rangle = \langle \xi' | e^{-iHd\tau} | \xi \rangle. \tag{C.53}$$

Inserindo a (C.48) à esquerda de $e^{-iHd\tau}$ na (C.53) temos que

$$\langle \xi' | e^{-iHd\tau} | \xi \rangle = \langle \xi' | \int | \eta \rangle \prod_{i=1}^{N} d\eta_i \langle \eta | e^{-iHd\tau} | \xi \rangle$$
$$= \int \langle \xi' | \eta \rangle \prod_{i=1}^{N} d\eta_i e^{-iH(\eta,\xi)d\tau} \langle \eta | \xi \rangle,$$

onde utilizamos a linearidade da integral de Berezin e os fatos que H possui ordenamento normal e é Grassmann-par (depende de produtos de um número par de operadores fermiônicos). Utilizando a (C.41) e a (C.42), temos que

$$\langle \xi', t + d\tau | \xi, t \rangle = (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_i e^{\sum_{i=1}^{N} \eta_i (\xi_i' - \xi_i) - iH(\eta, \xi) d\tau}, \qquad (C.54)$$

onde comutamos $\langle \xi' | \eta \rangle$ com o produto das diferenciais porque o argumento da exponencial é Grassmann-par.

Agora, vamos considerar o caso em que queremos a amplitude de transição de um estado $|\xi,t\rangle$ para um estado $|\xi',t'\rangle$ em um intervalo de tempo finito, onde t < t'. Dividimos o intervalo de tempo em passos $t, \tau_1, \tau_2, ..., \tau_L, t'$, onde

$$\tau_{k+1} - \tau_k = (t' - t)/(L + 1).$$

Para cada tempo τ_k , temos um conjunto "completo", por assim dizer, de auto-estados $|\xi_k, \tau_k\rangle$, i.e.,

$$c_i(\tau_k) |\xi_k, \tau_k\rangle = \xi_{k,i} |\xi_k, \tau_k\rangle.$$

Temos então que, utilizando a (C.46),

$$\langle \xi', t' | \xi, t \rangle = \langle \xi', t' | \int |\xi_L, \tau_L \rangle \prod_{i=1}^N (-d\xi_{L,i}) \langle \xi_L, \tau_L | \xi, t \rangle$$
$$= \int \langle \xi', t | \xi_L, \tau_L \rangle \prod_{i=1}^N (-d\xi_{L,i}) \langle \xi_L, \tau_L | \xi, t \rangle \tag{C.55}$$

onde utilizamos a linearidade da integral de Berezin. Do mesmo modo,

$$\langle \xi_L, \tau_L | \xi, t \rangle = \int \langle \xi_L, \tau_L | \xi_{L-1}, \tau_{L-1} \rangle \prod_{i=1}^{N} (-d\xi_{L-1,i}) \langle \xi_{L-1}, \tau_{L-1} | \xi, t \rangle. \quad (C.56)$$

Continuando esse procedimento, temos que

$$\langle \xi', t' | \xi, t \rangle = \int \dots \int \langle \xi', t' | \xi_L, \tau_L \rangle \prod_{i=1}^N (-d\xi_{L,i}) \langle \xi_L, \tau_L | \xi_{L-1}, \tau_{L-1} \rangle$$

$$\times \prod_{i=1}^N (-d\xi_{L-1,i}) \langle \xi_{L-1}, \tau_{L-1} | \xi_{L-2}, \tau_{L-2} \rangle \dots \langle \xi_2, \tau_2 | \xi_1, \tau_1 \rangle \prod_{i=1}^N (-d\xi_{1,i}) \langle \xi_1, \tau_1 | \xi, t \rangle$$

$$= (-1)^{NL} \int \dots \int \langle \xi', t' | \xi_L, \tau_L \rangle \prod_{i=1}^N d\xi_{L,i} \langle \xi_L, \tau_L | \xi_{L-1}, \tau_{L-1} \rangle$$

$$\times \prod_{i=1}^N d\xi_{L-1,i} \langle \xi_{L-1}, \tau_{L-1} | \xi_{L-2}, \tau_{L-2} \rangle \dots \langle \xi_2, \tau_2 | \xi_1, \tau_1 \rangle \prod_{i=1}^N d\xi_{1,i} \langle \xi_1, \tau_1 | \xi, t \rangle.$$

Note que cada $\langle \xi_k, \tau_k | \xi_{k-1}, \tau_{k-1} \rangle$ é dado pela (C.54), i.e.,

$$\langle \xi_k, \tau_k | \xi_{k-1}, \tau_{k-1} \rangle = (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \int \prod_{i=1}^N d\eta_{k-1,i} e^{\sum_{i=1}^N \eta_{k-1,i}(\xi_{k,i} - \xi_{k-1,i}) - iH(\eta_{k-1}, \xi_{k-1}) d\tau},$$

logo,

$$\begin{split} \langle \xi', t' | \xi, t \rangle &= (-1)^{NL} \int \dots \int (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_{L,i} e^{\sum_{i} \eta_{L,i} (\xi'_{i} - \xi_{L,i}) - iH(\eta_{L}, \xi_{L}) d\tau} \\ &\times \prod_{i=1}^{N} d\xi_{L,i} (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_{L-1,i} e^{\sum_{i} \eta_{L-1,i} (\xi_{L,i} - \xi_{L-1,i}) - iH(\eta_{L-1}, \xi_{L-1}) d\tau} \\ &\times \prod_{i=1}^{N} d\xi_{L-1,i} (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_{L-2,i} e^{\sum_{i} \eta_{L-2,i} (\xi_{L-1,i} - \xi_{L-2,i}) - iH(\eta_{L-2}, \xi_{L-2}) d\tau} \\ &\times \dots \times \prod_{i=1}^{N} d\xi_{1,i} (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_{0,i} e^{\sum_{i} \eta_{0,i} (\xi_{1,i} - \xi_{i}) - iH(\eta_{0}, \xi) d\tau} \\ &= (-1)^{\frac{N}{2}(N+1)(L+1)} \int \dots \int \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_{L,i} e^{\sum_{i} \eta_{L-1,i} (\xi'_{L-1,i} - \xi_{L-1,i}) - iH(\eta_{L-1}, \xi_{L-1}) d\tau} \\ &\times \prod_{i=1}^{N} d\xi_{L,i} \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_{L-1,i} e^{\sum_{i} \eta_{L-1,i} (\xi_{L-1,i} - \xi_{L-2,i}) - iH(\eta_{L-2}, \xi_{L-2}) d\tau} \\ &\times \prod_{i=1}^{N} d\xi_{L-1,i} \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_{L-2,i} e^{\sum_{i} \eta_{L-2,i} (\xi_{L-1,i} - \xi_{L-2,i}) - iH(\eta_{L-2}, \xi_{L-2}) d\tau} \\ &\times \dots \times \prod_{i=1}^{N} d\xi_{1,i} \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_{0,i} e^{\sum_{i} \eta_{0,i} (\xi_{1,i} - \xi_{i}) - iH(\eta_{0}, \xi) d\tau} \\ &\times \dots \times \prod_{i=1}^{N} d\xi_{1,i} \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_{0,i} e^{\sum_{i} \eta_{0,i} (\xi_{1,i} - \xi_{i}) - iH(\eta_{0}, \xi) d\tau} \end{split}$$

Como as exponenciais são Grassmann-par, podemos movê-las todas para a direita e combiná-las. Temos então que, lembrando a definição de integral múltipla de Berezin,

$$\langle \xi', t' | \xi, t \rangle = (-1)^{\frac{N}{2}(N+1)(L+1)} \int \prod_{i=1}^{N} d\eta_{L,i} \prod_{i=1}^{N} d\xi_{L,i} \prod_{i=1}^{N} d\eta_{L-1,i} \prod_{i=1}^{N} d\xi_{L-1,i}$$

$$\times \dots \times \prod_{i=1}^{N} d\eta_{1,i} \prod_{i=1}^{N} d\xi_{1,i} \prod_{i=1}^{N} d\eta_{0,i} \exp \left\{ S[\eta, \xi] \right\},$$

onde

$$S[\eta, \xi] = \sum_{i=1}^{N} \left[\eta_{0,i}(\xi_{1,i} - \xi_i) + \eta_{1,i}(\xi_{2,i} - \xi_{1,i}) + \dots + \eta_{L,i}(\xi_i' - \xi_{L,i}) \right] -i \left[H(\eta_0, \xi) + H(\eta_1, \xi_1) + \dots + H(\eta_L, \xi_L) \right] d\tau,$$

isto é,

$$S[\eta, \xi] = \sum_{k=1}^{L+1} \left[\sum_{i=1}^{N} \eta_{k-1,i}(\xi_{k,i} - \xi_{k-1,i}) - iH(\eta_{k-1}, \xi_{k-1}) d\tau \right], \qquad (C.57)$$

onde $\xi_0 = \xi$ e $\xi_{L+1} = \xi'$. Definindo as funções

$$\xi_i(\tau_k) = \xi_{k,i}, \ \eta_i(\tau_k) = \eta_{k,i} \tag{C.58}$$

por interpolação, e esperamos que no limite $L\to\infty$ tais interpolações se aproximem de curvas contínuas. Temos que

$$\eta_{k-1,i} = \eta_i(\tau_{k-1}) = \eta_i(\tau_k - d\tau) = \eta_i(\tau_k) - \dot{\eta}_i(\tau_k)d\tau + O(d\tau^2),$$

$$\xi_{k,i} - \xi_{k-1,i} = \xi_i(\tau_k) - \xi_i(\tau_k - d\tau) = \dot{\xi}_i(\tau_k)d\tau + O(d\tau^2),$$

onde, por derivadas das variáveis de Grassmann em relação ao tempo, subentendese a definição mostrada na (C.22). Daí,

$$S[\eta, \xi] = \sum_{k=1}^{L+1} \left[\sum_{i=1}^{N} \eta_{k-1,i} \frac{\xi_{k,i} - \xi_{k-1,i}}{d\tau} - iH(\eta_{k-1}, \xi_{k-1}) \right] d\tau$$

$$= \sum_{k=1}^{L+1} \left[\sum_{i=1}^{N} (\eta_{i}(\tau_{k}) - \dot{\eta}_{i}(\tau_{k}) d\tau) \dot{\xi}_{i}(\tau_{k}) - iH(\eta(\tau_{k}), \xi(\tau_{k})) \right] d\tau$$

$$+ i \sum_{i=1}^{L+1} \left[\frac{\partial}{\partial \eta_{i}} H(\eta(\tau_{k}), \xi(\tau_{k})) \dot{\eta}_{i}(\tau_{k}) d\tau + \frac{\partial}{\partial \xi_{i}} H(\eta(\tau_{k}), \xi(\tau_{k})) \dot{\xi}_{i}(\tau_{k}) d\tau \right] d\tau + O(d\tau^{3}),$$

e, no limite $L\to\infty$, como $d\tau\to0$, desprezamos termos de ordem $O(d\tau^2)$. Ou seja, para $L\to\infty$,

$$S[\eta, \xi] \to \sum_{k=1}^{L+1} \left[\sum_{i=1}^{N} \eta_i(\tau_k) \dot{\xi}_i(\tau_k) - iH(\eta(\tau_k), \xi(\tau_k)) \right] d\tau$$

$$\to \int_t^{t'} d\tau \left[\sum_{i=1}^{N} \eta_i(\tau) \dot{\xi}_i(\tau) - iH(\eta(\tau), \xi(\tau)) \right], \tag{C.59}$$

onde utilizamos a definição da integral de Riemann.

Antes de aplicar o limite do contínuo na medida de integração, vamos organizar seus termos. Temos um produto alternado de $d\eta$'s e $d\xi$'s, e queremos passar todos os $d\xi$'s para a esquerda. Temos que

$$\prod_{i=1}^{N} d\eta_{k,i} \prod_{i=1}^{N} d\xi_{k,i} = (-1)^{N^2} \prod_{i=1}^{N} d\xi_{k,i} \prod_{i=1}^{N} d\eta_{k,i},$$

pois cada $d\xi_{k,i}$ deve anti-comutar N vezes para se posicionar antes de todas as diferenciais $d\eta$. Logo, permutando $\prod_{i=1}^N d\xi_{L,i}$ para a esquerda, obtemos um fator $(-1)^{N^2}$. Permutando $\prod_{i=1}^N d\xi_{L-1,i}$ para a direita de $\prod_{i=1}^N d\xi_{L,i}$, obtemos um fator $(-1)^{N^2} \times (-1)^{N^2}$, pois temos que passar por dois produtos de $d\eta$'s. Continuando esse procedimento, temos ao final um fator

$$(-1)^{N^2 \sum_{i=1}^{L} i} = (-1)^{N^2 L(L-1)/2}.$$

Note que, no limite $L \to \infty$, tais fatores constantes são indeterminados. No entanto, sempre lidamos com amplitudes de transição normalizadas, de modo que tais fatores indeterminados se cancelam. Assim, a partir de agora vamos ignorar os fatores constantes que aparecerem multiplicando a integral.

Finalmente, para qualquer função $f = f(\eta(\tau), \xi(\tau))$, a integral sobre as funções $\xi(\tau)$ e $\eta(\tau)$ é definida como sendo

$$\int \prod_{\tau} \prod_{i=1}^{N} d\xi_{i}(\tau) \prod_{\tau} \prod_{j=1}^{N} d\eta_{j}(\tau) f(\eta(\tau), \xi(\tau))$$

$$:= \lim_{L \to \infty} \int \prod_{k=1}^{L} \prod_{i=1}^{N} d\xi_{k,i} \prod_{k=1}^{L} \prod_{j=1}^{N} d\eta_{k,j} f(\eta(\tau), \xi(\tau)). \tag{C.60}$$

Temos então a seguinte forma para a amplitude de transição $\langle \xi', t' | \xi, t \rangle$ expressa como uma integral de caminhos para férmions:

$$\langle \xi', t' | \xi, t \rangle = \int \prod_{\tau} \prod_{i=1}^{N} d\xi_i(\tau) \prod_{\tau} \prod_{i=1}^{N} d\eta_j(\tau) \exp \left\{ S \left[\eta, \xi \right] \right\}, \tag{C.61}$$

com o vínculo

$$\xi_i(t) = \xi_i, \ \xi_i(t') = \xi_i',$$

 $\forall i$, onde a $a \zeta \tilde{a} o$ fermiônica $S[\eta, \xi]$ é dada por

$$S[\eta, \xi] = \int_{t}^{t'} d\tau \left[\sum_{i=1}^{N} \eta_{i}(\tau) \dot{\xi}_{i}(\tau) - iH(\eta(\tau), \xi(\tau)) \right]. \tag{C.62}$$

Interpretando o índice i como sendo o ponto habitado pela variável de Grassmann em uma cadeia com N sítios, podemos considerar o caso em que as variáveis de Grassmann povoam um espaço contínuo. Definindo as variáveis $x_i = i/N$, i = 1, ..., N, com $\Delta x = x_{i+1} - x_i = 1/N$, podemos definir as funções

$$\psi(x_i, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \xi_i(\tau), \ \psi^{\dagger}(x_i, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \eta_i(\tau), \tag{C.63}$$

por interpolação. No limite $N \to \infty$, os mapas $\psi = \psi(x,\tau)$ e $\psi^{\dagger} = \psi^{\dagger}(x,\tau)$ descrevem campos contínuos no espaço-tempo com valores na álgebra de Grassmann \mathcal{G}_N . Definindo

$$H(\psi^{\dagger}(x,\tau),\psi(x,\tau)) := \lim_{N \to \infty} H(\eta(\tau),\xi(\tau)),$$

e considerando que

$$\sum_{i=1}^{N} \eta_i(\tau) \dot{\xi}_i(\tau) = \sum_{i=1}^{N} \psi^{\dagger}(x_i, \tau) \dot{\psi}(x_i, \tau) \Delta x \to \int dx \psi^{\dagger}(x, \tau) \dot{\psi}(x, \tau),$$

para $N \to \infty$, temos que a ação fermiônica se torna

$$S[\psi^{\dagger}, \psi] = \int_{t}^{t'} d\tau \left[-i \int dx \psi^{\dagger}(x, \tau) \partial_{\tau} \psi(x, \tau) - H(\psi^{\dagger}(x, \tau), \psi(x, \tau)) \right]. \tag{C.64}$$

Temos ainda que as medidas da integral de caminho se tornam

$$d\xi_i(\tau) = \sqrt{\Delta x} d\psi(x_i, \tau), \ \prod_{i=1}^N d\xi_i(\tau) = (\Delta x)^{N/2} \prod_{i=1}^N d\psi(x_i, \tau),$$

e o mesmo vale para $d\eta(\tau)$. Definimos, então, as medidas

$$D[\psi] = \prod_{\tau} \prod_{x} d\psi(x, \tau) = \lim_{N \to \infty} \prod_{\tau} \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{N}} d\psi(x_i, \tau), \tag{C.65}$$

$$D[\psi^{\dagger}] = \prod_{x} \prod_{x} d\psi^{\dagger}(x, \tau) = \lim_{N \to \infty} \prod_{x} \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{N}} d\psi^{\dagger}(x_i, \tau), \tag{C.66}$$

e assim, temos a integral de caminhos fermiônica para o caso contínuo:

$$Z = \int D[\psi]D[\psi^{\dagger}] \exp\left\{iS\left[\psi^{\dagger}, \psi\right]\right\},\tag{C.67}$$

onde a ação é dada pela (C.64).

D Entropia de Emaranhamento

D.1 Estados Puros e Mistos

Considere uma aparato que fabrica estados quânticos. Por exemplo, um fio de tungstênio aquecido emitindo elétrons em determinados estados de spin.

Como a máquina é imperfeita, nem sempre o mesmo estado é emitido. A cada estado possível, podemos então atribuir uma probabilidade *clássica* emissão. Temos então que o estado $|\psi_1\rangle$ é fabricado com probabilidade p_1 , o estado $|\psi_2\rangle$ é fabricado com probabilidade p_2 e assim por diante. Evidentemente, $0 \le p_i \le 1$ e $\sum_i p_i = 1$.

Queremos uma maneira compacta de representar o estado do sistema, levando em conta as probabilidades clássicas envolvidas. Suponha que estamos interessados no valor esperado de um observável O. Como cada estado $|\psi_i\rangle$ é emitido com uma certa probabilidade p_i , o valor esperado de O deve ser calculado como

$$\langle O \rangle = \sum_{i} p_{i} \langle \psi_{i} | O | \psi_{i} \rangle$$

$$= \operatorname{Tr} \left[O \sum_{i} p_{i} | \psi_{i} \rangle \langle \psi_{i} | \right]$$

$$= \operatorname{Tr} \left(O \rho \right),$$

onde definimos a matriz de densidade

$$\rho = \sum_{i} p_{i} |\psi_{i}\rangle \langle \psi_{i}|. \tag{D.1}$$

Utilizando a matriz de densidade, conseguimos expressar de forma compacta os estados possíveis do sistema, levando em conta também suas probabilidades clássicas de ocorrência. Por exemplo, considere um sistema de partículas em equilíbrio com um banho térmico à temperatura $T = \beta^{-1}$. Uma partícula no estado de energia $|E_i\rangle$ ocorre com probabilidade

$$p = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z},$$

o que implica que a matriz de densidade desse sistema é igual a

$$\rho = \frac{1}{Z} \sum_{i} e^{-\beta E_i} |E_i\rangle \langle E_i| = \frac{1}{Z} e^{-\beta H},$$

onde H é a Hamiltoniana do sistema.

A matriz de densidade possui algumas propriedades importantes. Primeiramente, é fácil ver que

$$\rho^{\dagger} = \rho$$

isto é, ρ é Hermitiana e, portanto, diagonalizável. Mais ainda,

$$Tr(\rho) = 1$$

e, para qualquer estado $|\phi\rangle$, o valor esperado $\langle\phi|\rho|\phi\rangle$ nos dá a amplitude de probabilidade de encontrar o sistema no estado $|\phi\rangle$ dado que ele está no estado ρ . Isso significa que ρ deve ser positivo semi-definida.

Suponha que diagonalizamos ρ , de modo que sua forma diagonal é dada por $\rho = \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|$. Como $\mathrm{Tr}(\rho) = 1, \sum_i \lambda_i = 1$ e, como $\rho \geq 0, \ \lambda \geq 0$. Logo, seus auto-valores de comportam como probabilidades.

Quando temos uma máquina perfeita que emite sempre um determinado estado, este possui probabilidade p=1 de ocorrência, enquanto que os outros estados possíveis possuem probabilidade zero de emissão. Dizemos que o estado do sistema é puro quando sua matriz de densidade é dada por $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$, para algum estado $|\psi\rangle$. Se outros estados podem ocorrer com probabilidade não-nula, dizemos que o sistema está em um estado misto, descrito pela matriz de densidade $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$.

Conhecendo a matriz de densidade ρ de um sistema, como saber se seu estado é puro ou misto? Considere

$$\mathcal{P} = \operatorname{Tr}(\rho^2).$$

Como $\text{Tr}(\rho^2) = \sum_i \lambda_i^2$, onde os λ_i 's são os auto-valores de ρ , temos que $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$ e $\text{Tr}(\rho^2) = 1$ apenas quando algum $\lambda_i = 1$, os outros sendo iguais a zero. Logo, $\mathcal{P} = 1$ se o estado do sistema é puro, enquanto que $\mathcal{P} < 1$ se o estado é misto, fornecendo uma medida da *pureza* dos estados do sistema.

Outra medida da pureza do sistema é fornecida pela entropia de Von Neumann, definida como

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log(\rho)). \tag{D.2}$$

Diagonalizando ρ , temos que

$$S(\rho) = -\sum_{i} \lambda_{i} \log(\lambda_{i}), \tag{D.3}$$

onde os λ_i 's são os auto-valores de ρ . Como $S(\rho)$ é uma soma de funções do tipo $-x\log x$, para $x\in [0,1],\ S(\rho)\geq 0$. Assim, tanto estados com alta probabilidade de ocorrência $(x\to 1)$ quanto estados com baixa probabilidade de ocorrência $(x\to 0)$, i.e., estados muito determinísticos, contribuem pouco para a entropia de Von Neumann. Quanto mais misto o estado, maior é o valor de $S(\rho)$.

Quando o estado é puro, $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$ para algum $|\psi\rangle$, e ρ possui apenas um auto-valor não-nulo $\lambda = 1$. Neste caso, a entropia de Von Neumann é dada por $S(\rho) = -0\log 0 = 0$. Ou seja, a entropia de Von Neumann é nula para estados puros.

D.2 Emaranhamento

Considere um sistema composto de duas partículas A e B, de spin 1/2. O sistema pode apresentar, essencialmente, quatro estados de spin. Um deles é o estado $|+1\rangle_A \otimes |+1\rangle_B = |+1,+1\rangle$, onde as duas partículas possuem spin +1/2. Este estado de spin +1 é um estado produto, isto é, pode ser escrito como um produto dos estados de cada partícula. É como se as partículas fossem independentes, o estado de uma não afeta o estado da outra. Por exemplo, o valor esperado de um operador que atua apenas sobre A, $O = O_A \otimes I_B$, sobre $|+1,+1\rangle$ é dado por

$$\langle O \rangle = \langle +1|_A \otimes \langle +1|_B (O_A \otimes I_B) | +1 \rangle_A \otimes | +1 \rangle_B$$
$$= \langle +1|_A O_A | +1 \rangle_A \langle +1|_B | +1 \rangle_B = \langle +1|_A O_A | +1 \rangle_A,$$

e depende apenas de A, não importando o que B seja.

Outro estado possível do sistema é o singleto

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+1, -1\rangle - |-1, +1\rangle),$$

de spin 0. Este é um estado emaranhado. Se soubermos que o estado do sistema é o singleto e medirmos o spin de uma das partículas, por exemplo, da partícula A, saberemos automaticamente qual é o spin da partícula B. Ao contrário do que acontece no estado produto, aqui os estados locais dos dois sistemas estão, de alguma forma, correlacionados, pois sabendo informações sobre um, conseguimos informações sobre o outro. Um operador que age apenas em A, $O = O_A \otimes I_B$, possui o seguinte valor esperado no estado $|\psi_{AB}\rangle$:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle +1|_A O_A | +1 \rangle_A + \langle -1|_A O_A | -1 \rangle_A \right),$$

e depende da probabilidade 1/2 de encontrar o sistema em algum dos estados.

O estado $|\psi_{AB}\rangle$ de um sistema dado pela união de dois sub-sistemas A e B é dito emaranhado se não existe uma maneira de escrevê-lo como um produto tensorial de um estado de A com um estado de B. Em outras palavras, dada uma base do espaço de Hilbert de A, $\{|\psi_A^{(i)}\rangle\}$, e uma base do espaço de Hilbert de B, $\{|\psi_B^{(j)}\rangle\}$, o estado

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i,j} \psi_{ij} |\psi_A^{(i)}\rangle \otimes |\psi_B^{(j)}\rangle$$

é emaranhado se os coeficientes ψ_{ij} não podem ser decompostos em um produto do tipo $\psi_{ij} = \psi_i \psi_j$. Estados emaranhados são, em certo sentido,

não-locais. De fato, em um estado produto, o sistema A é completamente independente do sistema B. Qualquer medida que fazemos localmente em A não nos diz nada sobre B. Em um estado emaranhado, por sua vez, uma medida local em A pode ser utilizada para obter informações sobre B, e este pode estar infinitamente distante de A.

Estados emaranhados são mistos, isto é, não são puros. No entanto, a probabilidade associada a cada estado possível na mistura é quântica por natureza, e não clássica. De fato, considere um estado dado por

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i} \psi_{i} |\psi_{A}^{(i)}\rangle \otimes |\psi_{B}^{(i)}\rangle.$$

Tal estado é um produto apenas quando algum $\psi_{i'}=1$ e o todos os outros $\psi_i=0,\ i\neq i'$. Caso contrário, $|\psi_{AB}\rangle$ é emaranhado. Tomando o valor esperado de um operador em $A,\ O_A\otimes I_B$, no estado $|\psi_{AB}\rangle$, temos que

$$\langle \psi_{AB} | (O_A \otimes I_B) | \psi_{AB} \rangle = \sum_{i,j} \psi_i^* \psi_j (\langle \psi_A^{(i)} | \otimes \langle \psi_B^{(i)} |) (O_A \otimes I_B) (|\psi_A^{(j)} \rangle \otimes |\psi_B^{(j)} \rangle)$$

$$= \sum_{i,j} \psi_i^* \psi_j \langle \psi_A^{(i)} | O_A | \psi_A^{(j)} \rangle \langle \psi_B^{(i)} | \psi_B^{(j)} \rangle$$

$$= \sum_{i,j} \psi_i^* \psi_j \langle \psi_A^{(i)} | O_A | \psi_A^{(j)} \rangle \delta_{ij}$$

$$= \sum_{i,j} |\psi_i|^2 \langle \psi_A^{(i)} | O_A | \psi_A^{(i)} \rangle,$$

isto é, o valor esperado de $O_A \otimes I_B$ é a média dos valores esperados em A, com probabilidade dada por $|\psi_i|^2$. Definindo a matriz de densidade reduzida de A como

$$\rho_A = \sum_i |\psi_i|^2 |\psi_A^{(i)}\rangle \langle \psi_A^{(i)}|,$$

temos que

$$\langle \psi_{AB} | (O_A \otimes I_B) | \psi_{AB} \rangle = \text{Tr}(O_A \rho_A).$$

Ou seja, se o estado AB está emaranhado, não conseguimos atribuir um estado puro a qualquer um dos sub-sistemas A ou B. O estados de A e de B são mistos, mas essa mistura é feita com probabilidades quânticas, e não clássicas. O emaranhamento entre dois sub-sistemas tem como efeito misturar seus estados locais.

Como a entropia de Von Neumann pode ser utilizada para quantificar a pureza de um estado, é natural supor que ela também pode quantificar seu grau de emaranhamento. Vimos que o estado local de um sistema emaranhado é misto. Logo, a entropia de Von Neumann desse estado local deve ser diferente de zero. Considere um sistema $A \cup B$, construído através da união de dois sub-sistemas A e B. O sistema está em um estado puro $|\psi_{AB}\rangle$, representado pela matriz de densidade $\rho = |\psi_{AB}\rangle \langle \psi_{AB}|$. Se $|\psi_{AB}\rangle$ é um estado emaranhado, o estados locais de A e B são mistos, dados por

$$\rho_A = \operatorname{Tr}_B \rho,$$

$$\rho_B = \operatorname{Tr}_A \rho.$$

Isto é, para encontrar os estados locais, devemos tomar o traço parcial de ρ sobre um dos sub-sistemas, encontrando, assim, a matriz de densidade reduzida correspondente. A entropia de emaranhamento é definida como sendo a entropia de Von Neumann dos estados locais:

$$S_A = -\text{Tr}\rho_A \log \rho_A, \tag{D.1}$$

$$S_B = -\text{Tr}\rho_B \log \rho_B. \tag{D.2}$$

É possível mostrar que $S_A = S_B$. Se o estado $|\psi_{AB}\rangle$ é emaranhado, os estados locais com certeza são mistos, e a entropia de emaranhamento é maior que zero. Se o estado $|\psi_{AB}\rangle$ é um produto, os estados locais são puros, e a entropia de emaranhamento é igual a zero. Assim, a entropia de emaranhamento nos fornece uma maneira de quantificar o grau de emaranhamento de um estado em um sistema bipartido.

E Fórmula de Kubo

Considere um sistema bidimensional descrito por uma Hamiltoniana H_0 , cujos auto-estados são dados por $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$. Podemos pensar na Hamiltoniana H_0 como descrevendo n elétrons de carga -e não-interagentes. Suponha que aplicamos um campo elétrico externo dado por $\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A}$ no gauge onde o potencial elétrico $A_0 = \phi = 0$. Esperamos um certo tempo para que uma configuração de equilíbrio se estabeleça, isto é, para que a velocidade das partículas seja constante no tempo: $\partial_t \mathbf{v} = 0$. No equilíbrio, a energia do campo elétrico é

$$W = ne \int_{r_0}^{r} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r}' = ne \int_{r_0}^{r} \mathbf{E} \cdot \frac{d\mathbf{r}'}{dt'} dt' = ne \int_{t_0}^{t} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} dt'.$$

Como \boldsymbol{v} não depende do tempo,

$$W = -ne\boldsymbol{v} \cdot \int_{t_0}^t \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t'} dt' = -\boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{A}(t),$$

onde $\mathbf{I} = ne\mathbf{v}$ é a corrente elétrica e consideramos que $\mathbf{A}(t_0) = 0$.

Próximo ao equilíbrio, podemos considerar que a energia do campo elétrico é, em primeira ordem, dada por $W(t) = -\boldsymbol{I}(t) \cdot \boldsymbol{A}(t)$. O campo elétrico introduz uma perturbação no sistema dada por $\Delta H(t) = -\boldsymbol{I}(t) \cdot \boldsymbol{A}(t)$. A Hamiltoniana perturbada é, então,

$$H(t) = H_0 + \Delta H(t). \tag{E.1}$$

Consideramos que H_0 comuta com a perturbação, para todo tempo t. Vamos supor que o campo elétrico aplicado seja um campo AC de frequência ω e amplitude constante, i.e., $\boldsymbol{E}(t) = \boldsymbol{E}e^{-i\omega t}$. Segue que o potencial vetor toma a forma

$$\mathbf{A}(t) = \frac{\mathbf{E}}{i\omega} e^{-i\omega t}.$$

Suponha que, próximo ao equilíbrio, em $t \to -\infty$, o sistema está em um estado $|0\rangle$, tal que $H_0 |0\rangle = E_0 |0\rangle$, de corrente nula, i.e.,

$$\langle 0|\boldsymbol{I}|0\rangle = 0.$$

Queremos saber qual é o valor esperado da corrente em um tempo t > 0. Em outras palavras, queremos calcular

$$\langle \boldsymbol{I}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \boldsymbol{I} | \psi(t) \rangle$$
,

onde

$$|\psi(t)\rangle = Te^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} H(t')dt'} |0\rangle.$$

Como

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}H(t')dt'} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\Delta H(t')dt'}$$

segue que, em primeira ordem na perturbação,

$$\begin{split} \langle \boldsymbol{I}(t) \rangle &= \langle 0 | \, Te^{\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} \Delta H(t') dt'} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \boldsymbol{I} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} Te^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} \Delta H(t') dt'} \, | 0 \rangle \\ &\approx \langle 0 | \left(1 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} \Delta H(t') dt' \right) e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \boldsymbol{I} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} \Delta H(t') dt' \right) | 0 \rangle \\ &\approx \langle 0 | \left(e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \boldsymbol{I} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt' [\Delta H(t'), e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \boldsymbol{I} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}] \right) | 0 \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt' \, \langle 0 | \left[\Delta H(t'), e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \boldsymbol{I} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \right] | 0 \rangle \,, \end{split}$$

onde utilizamos que o estado $|0\rangle$ não apresentava corrente. Temos que, na direção \hat{x} ,

$$\langle I_x(t)\rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle 0| \left[-I_x(t')A_x(t') - I_y(t')A_y(t'), e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} I_x e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \right] |0\rangle$$

$$=\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\langle 0|\left[-I_{y}(t')A_{y}(t'),e^{\frac{i}{\hbar}H_{0}t}I_{x}e^{-\frac{i}{\hbar}H_{0}t}\right]|0\rangle,$$

e, do mesmo modo, na direção \hat{y} ,

$$\langle I_y(t)\rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle 0| \left[-I_x(t') A_x(t'), e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} I_y e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \right] |0\rangle.$$

Escrevemos então

$$\langle I_k(t)\rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle 0| \left[-I_j(t') A_j(t'), e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} I_k e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \right] |0\rangle,$$

para j,k=x,y. Com $\boldsymbol{A}=\frac{\boldsymbol{E}}{i\omega}e^{-i\omega t}$ e $I_{j}(t')=e^{\frac{i}{\hbar}H_{0}t'}I_{j}e^{-\frac{i}{\hbar}H_{0}t'}$, segue que

$$\langle I_k(t)\rangle = -\frac{1}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^t dt' \langle 0| \left[e^{\frac{i}{\hbar}H_0t'} I_j e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t'}, e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} I_k e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \right] |0\rangle E_j e^{-i\omega t'}.$$

Temos que

$$\begin{split} [e^{\frac{i}{\hbar}H_0t'}I_je^{-\frac{i}{\hbar}H_0t'},e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}I_ke^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}] &= e^{\frac{i}{\hbar}H_0t'}I_je^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t'-t)}I_ke^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \\ &- e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}I_ke^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')}I_je^{-\frac{i}{\hbar}H_0t'}. \end{split}$$

Utilizando a relação $\sum_{n} |n\rangle \langle n| = 1$, temos que

$$\langle 0 | \left[e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t'} I_j e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t'}, e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} I_k e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \right] | 0 \rangle = \sum_n \langle 0 | I_j | n \rangle \langle n | I_k | 0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0)(t - t')}$$

$$- \sum_n \langle 0 | I_k | n \rangle \langle n | I_j | 0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0)(t - t')}.$$

Ou seja,

$$\begin{split} \langle I_k(t) \rangle &= -\frac{1}{\hbar \omega} \sum_n \int_{-\infty}^t dt' \left< 0 \right| I_j \left| n \right> \left< n \right| I_k \left| 0 \right> e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0)(t - t')} E_j e^{-i\omega t'} \\ &+ \frac{1}{\hbar \omega} \sum_n \int_{-\infty}^t dt' \left< 0 \right| I_k \left| n \right> \left< n \right| I_j \left| 0 \right> e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0)(t - t')} E_j e^{-i\omega t'}. \end{split}$$

Fazendo a mudança $\tau = t - t'$, temos que

$$\begin{split} \langle I_k(t) \rangle &= -\frac{1}{\hbar \omega} \sum_n \int_0^\infty d\tau \, \langle 0| \, I_j \, |n\rangle \, \langle n| \, I_k \, |0\rangle \, e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0 + \hbar \omega) \tau} E_j e^{-i\omega t} \\ &+ \frac{1}{\hbar \omega} \sum_n \int_0^\infty d\tau \, \langle 0| \, I_k \, |n\rangle \, \langle n| \, I_j \, |0\rangle \, e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0 - \hbar \omega) \tau} E_j e^{-i\omega t}, \end{split}$$

isto é,

$$\langle I_k(t) \rangle = \sigma_{ki}(\omega) E_i(t),$$
 (E.2)

onde

$$\sigma_{kj}(\omega) = -\frac{1}{\hbar\omega} \sum_{n} \int_{0}^{\infty} d\tau (\langle 0|I_{j}|n\rangle \langle n|I_{k}|0\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_{n} - E_{0} + \hbar\omega)\tau} - \langle 0|I_{k}|n\rangle \langle n|I_{j}|0\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{n} - E_{0} - \hbar\omega)\tau})$$
(E.3)

é a condutividade. Então, em primeira ordem, aplicando um campo elétrico com frequência ω , temos uma corrente, isto é, uma resposta, que também possui frequência ω . Chamamos tal comportamento de resposta linear.

Vamos calcular a condutividade de Hall $\sigma_{xy}(\omega)$. Temos que a integral da primeira soma converge apenas para energias $E_n < E_0 - \hbar \omega$, enquanto que a integral da segunda soma converge para energias $E_n > E_0 + \hbar \omega$. Vamos ignorar por um momento esses detalhes. Segue que

$$\sigma_{xy}(\omega) = -\frac{i}{\omega} \sum_{n \neq 0} \left(\frac{\langle 0|I_y|n\rangle \langle n|I_x|0\rangle}{E_n - E_0 + \hbar\omega} - \frac{\langle 0|I_x|n\rangle \langle n|I_y|0\rangle}{E_0 - E_n + \hbar\omega} \right). \tag{E.4}$$

No limite $\omega \to 0$, temos que

$$\frac{1}{\hbar\omega + \Delta E} = \frac{1}{\Delta E} \left(1 - \frac{\hbar\omega}{\Delta E} + O(\omega^2) \right).$$

Ou seja, nesse limite.

$$\sigma_{xy} = -\frac{i}{\omega} \sum_{n \neq 0} \left[\frac{I_y^{0n} I_x^{n0} + I_x^{0n} I_y^{n0}}{E_n - E_0} - \left(I_y^{0n} I_x^{n0} - I_x^{0n} I_y^{n0} \right) \frac{\hbar \omega}{(E_n - E_0)^2} \right] + O(\omega),$$

onde $I_k^{ij}=\langle i|I_k|j\rangle$. Como $\sigma_{xy}=-\sigma_{yx}$, devemos ter que $I_x^{0n}I_y^{n0}=-I_y^{0n}I_x^{n0}$, o que significa que o primeiro termo na soma acima se anula. Segue finalmente que a condutividade de Hall é dada pela fórmula de Kubo

$$\frac{\sigma_{xy}}{A} = i\hbar \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0|J_y|n\rangle \langle n|J_x|0\rangle - \langle 0|J_x|n\rangle \langle n|J_y|0\rangle}{(E_n - E_0)^2},$$
 (E.5)

onde A é a área do sistema onde os elétrons se movem.

Referências

- [1] Daniel C. Tsui, Horst L. Stormer, and Arthur C. Gossard. Twodimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Physical Review Letters*, 48(22):1559, 1982.
- [2] W. Lenz. Beiträge zum verständnis der magnetischen eigenschaften in festen körpern. *Physikalische Zeitschrift*, 21:613–615, 1920.
- [3] Ernst Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. Zeitschrift für Physik, 31(1):253–258, 1925.
- [4] Radu Coldea, D. A. Tennant, E. M. Wheeler, E Wawrzynska, D. Prabhakaran, M. Telling, K. Habicht, P. Smeibidl, and K. Kiefer. Quantum criticality in an ising chain: experimental evidence for emergent e8 symmetry. *Science*, 327(5962):177–180, 2010.
- [5] Peter Schauss. Quantum simulation of transverse ising models with rydberg atoms. Quantum Sci. Technol, 3:023001, 2018.
- [6] Pascual Jordan and Eugene P. Wigner. Über das paulische äquivalenzverbot. Z. Phys., 47:631–651, 1928.
- [7] N. N. Bogoljubov. On a new method in the theory of superconductivity. *Il Nuovo Cimento*, 7(6):794–805, 1958.
- [8] Ralph Blumenhagen and Erik Plauschinn. Introduction to Conformal Field Theory: With Applications to String Theory, volume 779. Springer Science & Business Media, 2009.
- [9] Philippe di Francesco, Pierre Mathieu, and David Sénéchal. Conformal Field Theory. Springer Science & Business Media, 2012.
- [10] Christoph Holzhey, Finn Larsen, and Frank Wilczek. Geometric and renormalized entropy in conformal field theory. *Nuclear Physics B*, 424(3):443–467, 1994.
- [11] Pasquale Calabrese and John Cardy. Entanglement entropy and quantum field theory. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2004(06):P06002, 2004.
- [12] Eduardo Fradkin. Field theories of condensed matter physics. Cambridge University Press, 2013.

- [13] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Physical Review Letters*, 45(6):494–497, 1980.
- [14] M. A. Paalanen, Daniel C. Tsui, and Arthur C. Gossard. Quantized hall effect at low temperatures. *Physical Review B*, 25(8):5566, 1982.
- [15] J. J. Sakurai and J. Napolitano. Modern Quantum Mechanics. Addison-Wesley, 2011.
- [16] David J. Thouless, Mahito Kohmoto, M. Peter Nightingale, and Marcel den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Physical Review Letters*, 49(6):405, 1982.
- [17] Robert B. Laughlin. Anomalous quantum hall effect: an incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. *Physical Review Letters*, 50(18):1395, 1983.
- [18] R. de Picciotto, M. Reznikov, M. Heiblum, V. Umansky, G. Bunin, and D. Mahalu. Direct observation of a fractional charge. *Nature*, 389(6647):162–164, 1997.
- [19] H. Bartolomei, M. Kumar, R. Bisognin, A. Marguerite, J. M. Berroir, E. Bocquillon, B. Plaçais, A. Cavanna, Q. Dong, U. Gennser, et al. Fractional statistics in anyon collisions. *Science*, 368(6487):173–177, 2020.
- [20] Xiao-Gang Wen. Topological orders in rigid states. *International Journal of Modern Physics B*, 4(02):239–271, 1990.
- [21] Gregory Moore and Nicholas Read. Nonabelions in the fractional quantum hall effect. *Nuclear Physics B*, 360(2-3):362–396, 1991.
- [22] Nicholas Read and Dmitry Green. Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum hall effect. *Physical Review B*, 61(15):10267, 2000.
- [23] Steven Weinberg. The Quantum Theory of Fields, volume 1. Cambridge University Press, 1995.
- [24] F. A. Berezin. The Method of Second Quantization. Academic Press, 1966.