



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS – GRADUAÇÃO EM FÍSICA

JOSE DIEGO MENEZES QUINTILIANO

**Magneto – transporte dissipativo não linear
no grafeno em regime de efeito Hall quântico
devido à interação elétron – fônon**

Manaus

2014

JOSE DIEGO MENEZES QUINTILIANO

**Magneto – transporte dissipativo não linear
no grafeno em regime de efeito Hall quântico
devido à interação elétron – fônon**

Dissertação apresentada ao
Programa de Pós – Graduação
em Física da Universidade
Federal do Amazonas como
requisito parcial para obtenção
do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Oleg
Grigorievich Balev

Manaus

2014

Ficha Catalográfica

Ficha catalográfica elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Q7m Quintiliano, Jose Diego Menezes
Magneto-transporte dissipativo não linear no grafeno em regime de efeito Hall quântico devido à interação elétron-fônon / Jose Diego Menezes Quintiliano. 2014
72 f.: il.; 31 cm.

Orientador: Oleg Grigorievich Balev
Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Amazonas.

1. Grafeno. 2. Níveis de Landau. 3. Corrente dissipativa. 4. Condutividade Hall. I. Balev, Oleg Grigorievich II. Universidade Federal do Amazonas III. Título

QUINTILIANO, J. D. M. Magneto – transporte dissipativo não linear no grafeno em regime de efeito Hall quântico devido à interação elétron – fônon. Dissertação apresentada ao Programa de Pós – Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovado em: 12 de Agosto de 2014

Banca Examinadora

Prof. Dr. Oleg G. Balev – UFAM

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof. Dr. Antonio Carlos A. Ramos – UFCA

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof. Dr. Sanderson Francisco F. P. da Silva – UFAM

Julgamento: _____ Assinatura: _____

“Para minhas filhas Maria Helena e Maria Esther.”

Agradecimentos

Em primeiro lugar, quero agradecer a Deus, por estar sempre ao meu lado, especialmente nos momentos mais difíceis, nos quais me ajudou a superar as dificuldades e a alcançar novas vitórias.

Agradeço ao meu orientador, Prof.^o Oleg G. Balev, pelo privilégio de ter sido seu aluno e orientando de graduação e mestrado, cujos ensinamentos muito contribuíram para o meu crescimento científico e intelectual.

Agradeço à Prof.^a Angsula Ghosh, Coordenadora do Programa de Pós-Graduação em Física da UFAM, que muito me ajudou nos processos burocráticos para aproveitamento de disciplinas, bem como em outras questões de caráter acadêmico.

Agradeço também a minha esposa, Diana, pela compreensão e incansável apoio durante o período de elaboração deste trabalho.

Talvez aqui valha a pena uma rápida digressão: Certa vez minha professora predileta do ginásio, Maria Caridade Brasil Vieira, disse-me: *"Se um dia você perder tudo e não lhe restar nada, lembre-se do seu conhecimento, pois ele ninguém tira de você, e com ele você pode recuperar tudo em dobro"*. Portanto, um agradecimento especial a todos os meus professores, pelo conhecimento que me ajudaram a construir ao longo de toda minha vida acadêmica.

*"If I have seen farther than others,
it is because I stood on the shoulders of giants."*
— SIR ISAAC NEWTON

Resumo

Na presente dissertação estudamos o efeito de um campo elétrico uniforme, aplicado ao longo de uma camada de grafeno, sobre o espectro dos níveis de Landau. Calculamos a densidade de corrente dissipativa até segunda ordem da constante de interação elétron-fônon para um sistema composto por um gás de elétrons bidimensional interagindo com fônons acústicos em uma rede de grafeno, nas condições do efeito Hall quântico em um campo elétrico finito. Mostramos que apenas transições reais de energia contribuem para a corrente dissipativa. Calculamos também a condutividade Hall do sistema, para a qual recuperamos a expressão conhecida $\sigma_H = 4(N + 1/2)e^2/h$.

Palavras-chave: Grafeno; Níveis de Landau; Corrente dissipativa; Condutividade Hall.

Abstract

In the present work we studied the effect of an uniform electric field applied along a graphene layer on the spectrum of Landau levels. We calculated the dissipative current density until second order to constant of electron-phonon interaction for a system composed of a two-dimensional gas of electrons interacting with acoustic phonons in a network of graphene, under conditions of the quantum Hall effect in a finite electric field. We show that only real energy transitions contribute to the dissipative current. We also calculated the Hall conductivity of the system, for which we recover the known expression $\sigma_H = 4(N + 1/2)e^2/h$.

Keywords: Graphene; Landau levels; Dissipative current; Hall conductivity.

Lista de Figuras

1.1	O grafeno é um material de construção 2D para materiais de carbono de todas as outras dimensionalidades. Ele pode ser embrulhado em fulerenos 0D, enrolado em nanotubos 1D ou empilhados em grafite 3D [1].	2
2.1	Rede "favo de mel". Os vetores δ_1 , δ_2 e δ_3 conectam os átomos de carbono, separados pela distância $a = 1.42 \text{ \AA}$. Os vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 são os vetores base da rede de Bravais triangular.	6
2.2	Esquerda: espectro de energia (em unidades de t) para $t = 2.7 \text{ eV}$. Direita: bandas de energia próximas a um dos pontos de Dirac [9].	7
3.1	Elétrons 2D em um campo magnético perpendicular. Uma corrente I é dirigida através do sistema via os contatos C1 e C4. A resistência longitudinal pode ser medida entre os contatos C5 e C6 (ou alternativamente entre os contatos C2 e C3). A resistência transversal (ou Hall) é medida, por exemplo, entre os contatos C3 e C5.	10
3.2	Assinatura típica do efeito Hall quântico (medida por J. Smet, MPI-Stuttgart). Cada platô na resistência Hall é acompanhado por um anulamento na resistência longitudinal. A resistência Hall clássica está indicada pela linha traço-pontilhada. Os números rotulando os platôs: o inteiro N denota o EHQI e $N = P/Q$, com P e Q inteiros, indicam o efeito Hall quântico fracionário (EHQF).	13

4.1	Níveis de Landau como função do campo magnético. (a) Caso não relativístico com $\epsilon_n = \hbar\omega_c(n + 1/2) \propto B(n + 1/2)$. (b) Caso relativístico com $\epsilon_{n,\kappa} = \kappa(\hbar v_F/l_B)\sqrt{2n} \propto \kappa\sqrt{Bn}$ [43].	28
4.2	Primeiros dezenove níveis de Landau normalizados pela energia ciclotrônica $\epsilon_c = \hbar\omega_c$, em função do parâmetro $\eta = E/v_FB$. O valor do momento k_x foi tomado igual a zero. O campo magnético é igual a $B = 27$ Tesla. . . .	29
4.3	Níveis de Landau normalizados pela energia ciclotrônica ϵ_c , em função do número quântico n . $k_x = 2\pi/600a'$, onde $a' = a\sqrt{3} = 2.456 \text{ \AA}$ é o espaçamento da rede triangular. O campo magnético é igual a $B = 27$ Tesla.	30
5.1	Oito primeiros níveis de Landau no grafeno. Enquanto os NLs na banda de condução ficam curvados para cima quando se aproximam da borda da amostra, os NLs na banda de valência são curvados para baixo. O NL $n = 0$ aumenta no ponto de Dirac K e diminui no ponto de Dirac K' . . .	48
5.2	Acoplamento de elétrons a fônons acústicos no plano. As linhas retas representam os elétrons, a linha ondulada representa fônons no plano. . .	49

Sumário

1	Introdução	1
2	Hamiltoniano de Dirac no grafeno	5
3	Introdução ao efeito Hall	9
3.1	Efeito Hall clássico	10
3.2	Efeito Hall quântico inteiro	13
3.3	Efeito Hall quântico fracionário	14
3.4	Efeito Hall quântico relativístico	16
4	Níveis de Landau do grafeno em um campo elétrico finito	17
4.1	Formulação do problema	18
4.2	Método de diagonalização do Hamiltoniano	20
4.3	Campo elétrico nulo	22
4.4	Campo elétrico finito	23
4.5	Discussões adicionais	27
5	Fluxos dissipativos e não dissipativos no grafeno	32
5.1	Equações de movimento de elétrons e fônons	33
5.2	Expansão dos operadores eletrônicos e fonônicos	35
5.3	Densidade de corrente dissipativa	41
5.4	Condutividade Hall	46

5.5	Discussões adicionais	48
6	Conclusões	51
A	Autofunções do Hamiltoniano de Dirac no espaço de Hilbert	53
B	Cálculo do elemento de matriz $\langle \alpha y \alpha \rangle$	56

Capítulo 1

Introdução

Grafeno é o nome dado a uma rede plana bidimensional (2D) formada exclusivamente por átomos de carbono fortemente ligados entre si em um arranjo hexagonal. Fullerenos são moléculas onde os átomos de carbono estão arranjados esfericamente, constituindo objetos zero-dimensionais (0D) com estados discretos de energia. A introdução de pentágonos no grafeno cria defeitos de curvatura positiva, possibilitando a formação de fullerenos a partir do "embrulho" de folhas de grafeno. Nanotubos de carbono são folhas de grafeno enroladas ao longo de um determinado eixo, formando um cilindro cujo diâmetro é muito menor do que o seu comprimento. De um ponto de vista físico, os nanotubos de carbono podem ser pensados como objetos unidimensionais (1D). Por sua vez, a grafite corresponde aos diversos empilhamentos de folhas de grafeno que são fracamente acopladas por forças de Van der Waals, constituindo um arranjo tridimensional (3D) de átomos de carbono [1] (Fig. 1.1).

Quando riscamos uma folha de papel com um lápis, estamos de fato produzindo empilhamentos de grafeno, alguns dos quais podem até mesmo ser constituídos por camadas individuais. Não obstante, desde a invenção do lápis em 1564 [2] até 2004 [3], portanto passados 440 anos, o homem ainda não tinha sido capaz de isolar experimentalmente camadas individuais de grafite. Isto porque, em primeiro lugar, pensava-se que cristais

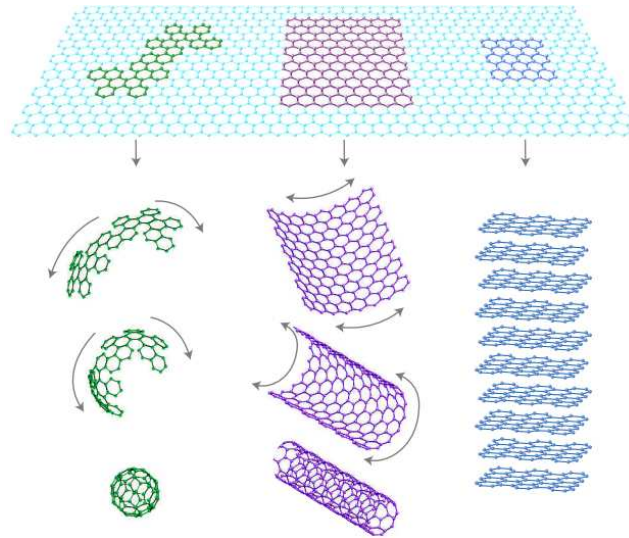


Figura 1.1: O grafeno é um material de construção 2D para materiais de carbono de todas as outras dimensionalidades. Ele pode ser embrulhado em fulerenos 0D, enrolado em nanotubos 1D ou empilhados em grafite 3D [1].

estritamente 2D fossem termodinamicamente instáveis e portanto, não poderiam existir¹ [4], [5], [6] e [7]; em segundo lugar, não existia tecnologia para pesquisar camadas com a espessura de apenas um átomo entre os traços macroscópicos produzidos por um lápis [8].

Em 2004, Novoselov e Geim [3] notaram que o grafeno poderia ser identificado a partir de um efeito óptico sutil que ele cria sobre o topo de um substrato de SiO_2 apropriadamente escolhido, que permite sua observação com um simples microscópio óptico. Daí a seguinte conclusão: o grafeno é relativamente fácil de fazer, mas não tão fácil de encontrar² [9].

A fabricação do grafeno foi seguida pela busca de outros cristais bidimensionais (por

¹Esta teoria, proposta por Landau e Peierls há quase 80 anos, destacava que uma contribuição divergente de flutuações térmicas em redes cristalinas de baixa dimensionalidade deveria causar deslocamentos atômicos comparáveis às distâncias interatômicas, em qualquer temperatura finita [6].

²Por exemplo, apenas 5% de diferença na espessura de SiO_2 (315 nm em vez da espessura padrão de 300 nm) pode tornar a camada de grafeno completamente invisível.

exemplo, nitreto de boro e semicamada de BSCCO) que, no entanto, não possuem as mesmas propriedades interessantes do grafeno [10]. Desde a sua descoberta até os dias atuais, a quantidade de artigos publicados na literatura especializada sobre esse material tem crescido vertiginosamente. Em 2010, Geim e Novoselov foram agraciados com o Prêmio Nobel de Física pelo feito histórico de terem sido os primeiros a isolar folhas de grafeno, além de suas experiências inovadoras sobre este material.

As propriedades eletrônicas do grafeno são muito diferentes daquelas exibidas pelos sistemas eletrônicos bidimensionais convencionais (SE2DC), representados pelas estruturas tipo MOS (*metal-oxide-semiconductor*) e heteroestruturas. Por exemplo, quando uma folha de grafeno dopada (de modo a ter condutância eletrônica) é suficientemente limpa e fica sujeita a elevados campos magnéticos, observa-se um efeito Hall quântico relativístico (EHQR), $\sigma_H = 4(N + 1/2)e^2/h$, diferentemente dos SE2DC, onde se observa o efeito Hall quântico inteiro (EHQI), $\sigma_H = 2(N + 1)e^2/h$. Desprezado o desdobramento de spin, para o grafeno, N é o número do mais alto nível de Landau ocupado, enquanto para os SE2DC, N é o maior inteiro contido entre 0 e $E_F/\hbar\omega_c$, onde E_F é a energia de Fermi e $\hbar\omega_c$ é a energia ciclotrônica. Esta nova regra de quantização pode ser atribuída aos férmions de Dirac sem massa, conforme predito por vários autores [11], [12], [13] e [14]. Além de ser qualitativamente diferente do EHQI observado em SE2DC, o EHQR no grafeno pode ser observado em temperatura ambiente, devido às elevadas energias ciclotrônicas dos seus portadores de carga [15].

Em física da matéria condensada a equação de Schrödinger é usada para descrever as propriedades eletrônicas da maioria dos materiais. Porém, para o grafeno ela não se aplica, uma vez que seus portadores de carga se assemelham a partículas relativísticas, as quais são melhor representadas pela equação de Dirac [16], [17] e [18]. Apesar do movimento dos elétrons em torno dos átomos de carbono não ter nada de relativístico, sua interação com o potencial periódico da rede cristalina do grafeno dá origem a novas quasipartículas que em baixas energias são descritas pela equação (2+1)-dimensional de Dirac, com uma velocidade da luz efetiva aproximadamente igual a $v_F \approx c/300$, onde c

é a velocidade da luz no vácuo³. Essas quasipartículas, chamadas de férmions de Dirac sem massa, podem ser encaradas como elétrons que perderam sua massa de repouso m_0 , ou analogamente, como neutrinos que adquiriram uma carga eletrônica e .

No grafeno, os férmions de Dirac apresentam uma outra característica particularmente interessante que é a sua insensibilidade a potenciais eletrostáticos externos devido ao fenômeno de tunelamento Klein, isto é, a sua perfeita transmissão através de barreiras arbitrariamente altas e largas⁴ [19] e [20].

Nesta dissertação, estudamos o efeito de um campo elétrico uniforme, quando aplicado ao longo de uma camada de grafeno, sobre o espectro dos níveis de Landau. Em seguida, estudamos o comportamento de um gás de elétrons bidimensional interagindo com fônons acústicos em uma rede de grafeno nas condições do efeito Hall quântico num campo elétrico finito, donde calculamos a densidade de corrente dissipativa até segunda ordem com respeito à constante de interação elétron-fônon, estendendo para o grafeno o método da Ref. [21], aplicado a um sistema bidimensional elétron-fonônico em heteroestruturas. Por fim, calculamos a condutividade Hall do grafeno para um campo elétrico finito.

³Desde que o grafeno tem dois elétrons por célula unitária, a banda de valência está completamente cheia e tipicamente as propriedades do sistema são determinadas pela natureza do seu espectro nas vizinhanças onde as bandas de valência e condução se tocam. Existem seis desses pontos, chamados pontos de Dirac (também são chamados de pontos de Fermi, como ocorre algumas vezes na literatura), em cuja vizinhança o espectro sem gap tem um formato cônico e linear ao vetor de onda, o que confirma o fato de estarmos lidando com partículas relativísticas.

⁴Dito de outra forma: os férmions de Dirac podem ser transmitidos com probabilidade unitária sobre uma região classicamente proibida.

Capítulo 2

Hamiltoniano de Dirac no grafeno

O grafeno é uma folha plana de átomos de carbono em ligação sp^2 com espessura de apenas um átomo, reunidos em uma estrutura cristalina hexagonal, podendo ser pensado como formado por anéis de benzeno sem os átomos de hidrogênio. Sua estrutura cristalina não representa uma rede de *Bravais*, isto é, um conjunto infinito de pontos discretos com arranjo e orientação que parecem exatamente os mesmos, de qualquer um dos pontos do qual o arranjo é visualizado.

Na Fig. 2.1 ilustramos a rede hexagonal do grafeno. Quando comparamos os pontos A e B, notamos que os vizinhos desses dois pontos são diferentes: enquanto o ponto A tem vizinhos mais próximos nas direções nordeste, noroeste e sul, o ponto B tem vizinhos mais próximos nas direções norte, sudeste e sudoeste. Isto significa que os dois pontos não são equivalentes de um ponto de vista cristalográfico — embora eles possam ser equivalentes de um ponto de vista químico, isto é, ocupado pelo mesmo tipo de átomo ou íon (carbono no caso do grafeno). Contudo, tanto os pontos A quanto os pontos B formam uma subrede de *Bravais* triangular, de modo que a rede hexagonal do grafeno pode ser visualizada como uma rede de *Bravais* triangular com uma base de dois átomos por célula unitária.

Para calcularmos as bandas eletrônicas em uma rede com N_s subredes de *Bravais*, isto é, uma base com N_s pontos, precisamos descrever a função de onda eletrônica geral como

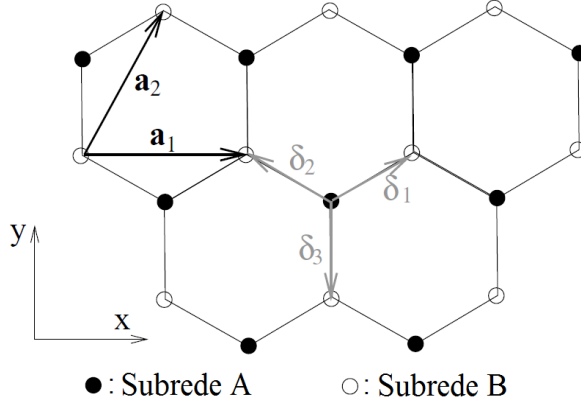


Figura 2.1: Rede "favo de mel". Os vetores δ_1 , δ_2 e δ_3 conectam os átomos de carbono, separados pela distância $a = 1.42 \text{ \AA}$. Os vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 são os vetores base da rede de Bravais triangular.

uma superposição de N_s diferentes funções de ondas, cada uma satisfazendo o Teorema de Bloch para cada subrede [22]. Formalmente, isto pode ser descrito em termos de uma matriz $N_s \times N_s$, cujos autovalores fornecem N_s diferentes bandas de energias. Para o grafeno $N_s = 2$, portanto, são obtidas duas diferentes bandas de energias: a banda de condução e a banda de valência.

O Hamiltoniano para os elétrons de baixa energia no espaço recíproco é dado por

$$H_{\mathcal{D}}(\mathbf{k}) = t \begin{pmatrix} 0 & \gamma_{\mathbf{k}}^* \\ \gamma_{\mathbf{k}} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

o qual é obtido a partir da aproximação *tight-binding*, onde t ($\approx 2.8 \text{ eV}$) é a energia correspondente aos saltos eletrônicos entre os vizinhos mais próximos, isto é, entre os pontos A e B; $\gamma_{\mathbf{k}}$ corresponde à soma dos fatores de fase de vizinhos mais próximos. Explicitamente, $\gamma_{\mathbf{k}} = 1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3}$, onde $\mathbf{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2} (\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y})$, $\mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1 \frac{\sqrt{3}a}{2} (-\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y})$ e $a = |\delta_3| = 1.42 \text{ \AA}$ é a distância entre os átomos de carbono vizinhos mais próximos (veja Fig. 2.1).

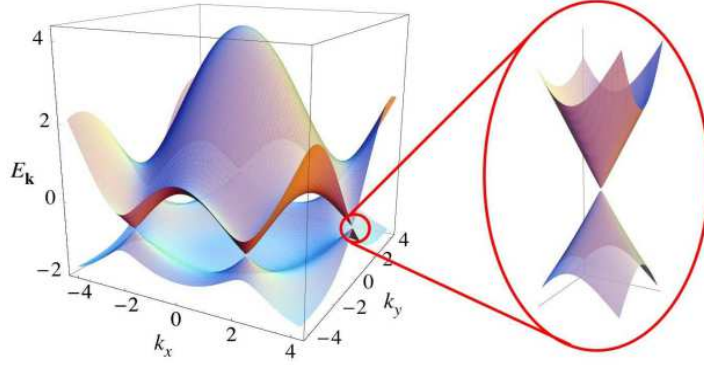


Figura 2.2: Esquerda: espectro de energia (em unidades de t) para $t = 2.7$ eV. Direita: bandas de energia próximas a um dos pontos de Dirac [9].

A estrutura de banda do grafeno [23] é obtida diagonalizando-se o Hamiltoniano (2.1), donde são determinadas duas bandas, nomeadas por $\kappa = \pm$, com $\epsilon_{\kappa}(\mathbf{k}) = \kappa t |\gamma_{\mathbf{k}}|$, as quais estão representadas na Fig. 2.2.

A hibridização sp^2 entre um orbital s e dois orbitais p levam a uma estrutura trigonal planar com a formação de uma ligação σ entre os átomos de carbono, que estão separados por 1.42 \AA . A ligação σ é responsável pela robusteza da estrutura de rede em todas suas formas alotrópicas. O orbital p não-afetado, que é perpendicular à estrutura planar, pode se ligar covalentemente com os átomos de carbono vizinhos levando à formação de uma banda π superior (condução) e uma banda π^* inferior (valência). Além disso, a banda de valência ($\kappa = -$) toca a banda de condução ($\kappa = +$) em seis pontos não equivalentes K e K' da primeira zona de Brillouin [9].

Nas vizinhanças dos pontos K e K' , a forma cônica das duas bandas lembra a dispersão de energia de partículas relativísticas, $\mathcal{E} = \pm \sqrt{m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2}$, em termos da velocidade da luz c e da massa da partícula m . Se $m = 0$, obtém-se $\mathcal{E} = \pm c |\mathbf{p}|$, como no caso dos elétrons de baixa energia no grafeno, os quais são tratados como férmions de Dirac sem-massa.

A analogia entre os elétrons no grafeno e as partículas relativísticas sem-massa é corroborada pela expansão do Hamiltoniano (2.1) nas vizinhanças dos pontos de contato

K e K' , $\mathbf{k} = \pm\mathbf{K} + \mathbf{p}/\hbar$, onde $|\mathbf{p}/\hbar| \ll |\mathbf{K}|$. Expandindo a função $\gamma_{\mathbf{K}+\mathbf{p}/\hbar}$ em primeira ordem (em torno do ponto K), obtemos

$$H_{\mathcal{D}} = t \begin{pmatrix} 0 & \nabla\gamma_{\mathbf{K}}^* \cdot \mathbf{P} \\ \nabla\gamma_{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{P} & 0 \end{pmatrix} = \frac{3ta}{2\hbar} \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} = v_F \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.2)$$

onde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ são as matrizes de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

e velocidade de Fermi v_F desempenha o mesmo papel da velocidade da luz c , cujo valor é cerca de 300 vezes maior, $c \simeq 300v_F$.

Um cálculo análogo para a expansão da função $\gamma_{-\mathbf{K}+\mathbf{p}/\hbar}$ em primeira ordem (em torno do ponto K'), resulta

$$H'_{\mathcal{D}} = -v_F \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}^*, \quad (2.4)$$

com $\boldsymbol{\sigma}^* = (\sigma_x, -\sigma_y)$. Ambos os Hamiltonianos (2.2) e (2.4) possuem o mesmo espectro de energia, o qual é portanto duplamente degenerado em relação aos pontos de Dirac K e K' . No que se segue, usaremos o Hamiltoniano (2.2), algumas vezes chamado de Hamiltoniano de Dirac ou Hamiltoniano de Weyl.

Capítulo 3

Introdução ao efeito Hall

O efeito Hall foi descoberto por Edwin Herbert Hall em 1879 [24] quando ele trabalhava em sua tese de doutorado em Física na *Johns Hopkins University*. No experimento de Hall, uma fina folha de ouro exposta sobre uma placa de vidro foi submetida a um campo magnético perpendicular ao seu plano. Hall observou uma diferença de potencial (voltagem Hall) entre os lados da amostra durante o fluxo de uma corrente elétrica longitudinal¹. A razão entre a voltagem Hall e a corrente elétrica longitudinal ficou conhecida como resistência Hall, cujo valor é característico para cada material.

Em 1975, Kawaji *et al.* [25] foram os primeiros a realizar medições para as condutividades longitudinal e Hall em fortes campos magnéticos a baixas temperaturas. Entretanto, a observação dos platôs Hall por Klitzing *et al.* [26], evidenciando a quantização da resistividade (e conseqüentemente da condutividade) Hall, ocorreria apenas cinco anos depois, em Fevereiro de 1980. Em 1985, Klitzing seria agraciado com o Prêmio Nobel de Física, pela descoberta do EHQL. Em 1982, Tsui, Störmer e Gossard descobriram a existência de platôs Hall com números quânticos fracionários [27], cuja explicação teórica foi proposta no ano seguinte, em 1983, por Laughlin [28]. Pela descoberta e teoria do efeito Hall quântico fracionário (EHQF), Tsui, Störmer e Laughlin receberam o Prêmio

¹Apesar de vários experimentos em Física naquela época envolverem o uso de corrente elétrica, a descoberta experimental do elétron somente ocorreria em 1897, por J. J. Thomson.

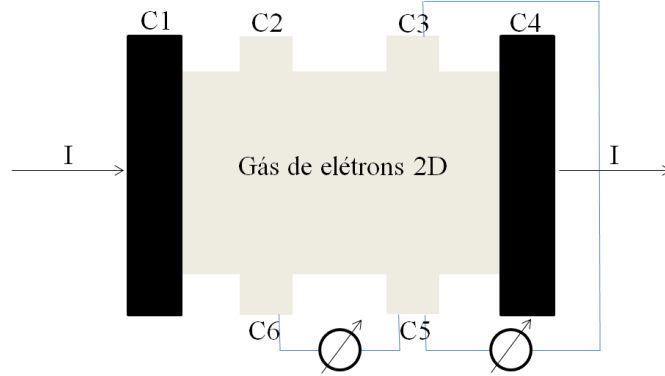


Figura 3.1: Elétons 2D em um campo magnético perpendicular. Uma corrente I é dirigida através do sistema via os contatos C1 e C4. A resistência longitudinal pode ser medida entre os contatos C5 e C6 (ou alternativamente entre os contatos C2 e C3). A resistência transversal (ou Hall) é medida, por exemplo, entre os contatos C3 e C5.

Nobel de Física de 1998.

Mais recentemente, em 2005, Novoselov *et al.* [11] e Zhang *et al.* [12] observaram experimentalmente o EHQR para o grafeno, cuja regra de quantização revelou uma série de números inteiros não usual para os platôs Hall, diferentemente daquela observada para os SE2DC.

3.1 Efeito Hall clássico

Considere um sistema bidimensional submetido a um campo magnético perpendicular, onde uma corrente I é dirigida através da amostra, podendo-se medir ambas as resistências longitudinal e transversal (também chamada de resistência Hall) (Fig. 3.1). Hall mostrou que a resistência transversal de uma placa metálica fina varia linearmente com a intensidade do campo magnético \mathbf{B} [24], $R_H = \mathcal{K}B$. Vamos demonstrar que a constante de proporcionalidade \mathcal{K} é igual a $\frac{1}{qn_{el}}$, onde q é a carga do elétron ($q = -e$, em termos da carga elementar e , que definimos como positiva) e n_{el} é a densidade de elétrons 2D.

O efeito Hall clássico pode ser entendido a partir da aplicação do modelo de Drude

para transporte difusivo em um metal. Nesse modelo, consideram-se os portadores de carga independentes uns dos outros (aproximação do elétron independente), bem como independentes dos íons da amostra (aproximação do elétron livre) [22]. Um elétron de momento \mathbf{p} é descrito pela equação de movimento:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{p}}{m_b} \times \mathbf{B} \right) - \frac{\mathbf{p}}{\tau}, \quad (3.1)$$

onde \mathbf{E} e \mathbf{B} são os campos elétrico e magnético, respectivamente; m_b é a massa de banda do elétron. O último termo corresponde aos processos de relaxação devido à difusão de elétrons por impurezas genéricas do metal, onde τ é o tempo de relaxação². As propriedades de transporte macroscópicas, isto é, resistividade e condutividade do sistema, são obtidas da solução estática da equação de movimento, $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = 0$,

$$eE_x = -\frac{eB}{m_b}p_y - \frac{p_x}{\tau} \quad (3.2)$$

$$eE_y = -\frac{eB}{m_b}p_x - \frac{p_y}{\tau}, \quad (3.3)$$

onde $\mathbf{p} = (p_x, p_y, 0)$, $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$ e $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Nas Eqs. (3.2) e (3.3) notamos o surgimento da frequência característica, $\omega_c = \frac{eB}{m_b}$, que é chamada de frequência ciclotrônica, porque ela representa o movimento ciclotrônico de uma partícula carregada num campo magnético. Podemos reescrever as Eqs. (3.2) e (3.3) em termos da frequência ciclotrônica e da condutividade de Drude $\sigma_0 = \frac{n_{el}e^2\tau}{m_b}$,

$$\sigma_0 E_x = -en_{el} \frac{p_x}{m_b} - en_{el} \frac{p_y}{m_b} (\omega_c \tau) \quad (3.4)$$

$$\sigma_0 E_y = en_{el} \frac{p_x}{m_b} (\omega_c \tau) - en_{el} \frac{p_y}{m_b}. \quad (3.5)$$

²Suponhamos que um elétron experimente uma colisão (isto é, sofra uma alteração repentina em sua velocidade) com uma probabilidade por unidade de tempo igual a $\frac{1}{\tau}$. Então, a probabilidade de um elétron sofrer uma colisão em qualquer intervalo de tempo infinitesimal dt é exatamente $\frac{dt}{\tau}$. O tempo τ é conhecido como tempo de relaxação, tempo de colisão ou tempo livre médio, tendo papel fundamental na teoria da condução em metais. Deste modo, um elétron qualquer viajará, em média, por um tempo τ antes da sua próxima colisão [22].

As Eqs. (3.4) e (3.5) são melhor representadas na forma matricial

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = -\frac{en_{el}}{\sigma_0 m_b} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau \\ -\omega_c \tau & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Em termos da densidade de corrente $\mathbf{j} = -en_{el} \frac{\mathbf{p}}{m_b}$, podemos usar $\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}$ para obter o tensor resistividade

$$\rho = \sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma_0} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau \\ -\omega_c \tau & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

De (3.7), segue que a resistividade Hall (termos não diagonais do tensor de resistividade ρ) é dada por

$$\rho_H = \frac{\omega_c \tau}{\sigma_0} = \frac{B}{en_{el}}. \quad (3.8)$$

Por sua vez, o tensor condutividade é obtido pela inversão da matriz (3.7),

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_L & -\sigma_H \\ \sigma_H & \sigma_L \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

onde $\sigma_L = \sigma_0 / (1 + \omega_c^2 \tau^2)$ e $\sigma_H = \sigma_0 \omega_c \tau / (1 + \omega_c^2 \tau^2)$.

No limite teórico para uma amostra sem impurezas, isto é, para longos tempos de espalhamento $\tau \rightarrow \infty$, os tensores resistividade e condutividade são dados respectivamente por

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & \frac{B}{en_{el}} \\ -\frac{B}{en_{el}} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{en_{el}}{B} \\ \frac{en_{el}}{B} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

As propriedades de transporte para uma amostra limpa são completamente governadas, na presença de um campo magnético, pelas componentes não diagonais dos tensores de resistividade e condutividade.

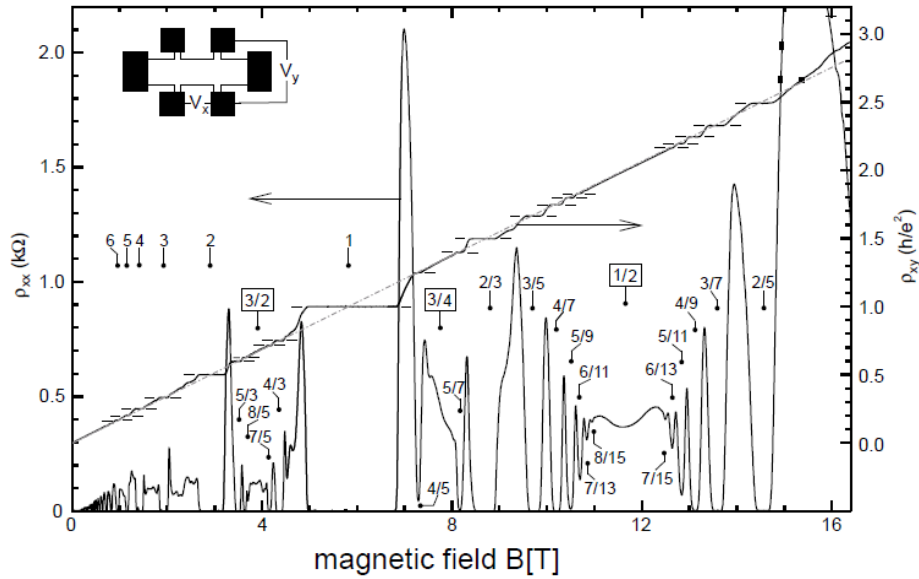


Figura 3.2: Assinatura típica do efeito Hall quântico (medida por J. Smet, MPI-Stuttgart). Cada platô na resistência Hall é acompanhado por um anulamento na resistência longitudinal. A resistência Hall clássica está indicada pela linha traço-pontilhada. Os números rotulando os platôs: o inteiro N denota o EHQI e $N = P/Q$, com P e Q inteiros, indicam o efeito Hall quântico fracionário (EHQF).

3.2 Efeito Hall quântico inteiro

O EHQI é um dos mais interessantes fenômenos da mecânica quântica no transporte de elétrons 2D em fortes campos magnéticos. Como mencionado anteriormente, foi descoberto por Klitzing, Dorda e Pepper em 1980 [26]. A sua descoberta está intimamente relacionada aos avanços tecnológicos em ciência dos materiais, a saber, a fabricação de transistors de efeito de campo de alta qualidade para a realização de gases de elétrons 2D.

Em um SE2DC, o EHQI ocorre apenas em baixas temperaturas, quando a escala de energia definida pela energia térmica, $k_B T$, é muito menor do que o espaçamento dos níveis de Landau, $\hbar\omega_c$. O EHQI consiste da quantização da resistividade Hall, que não é mais linear com B , conforme o tratamento clássico da seção anterior, porém, apresenta

platôs, os quais dependem das constantes universais e de um inteiro N ,³

$$\rho_H = \left(\frac{h}{e^2} \right) \frac{1}{N}. \quad (3.11)$$

A quantização da resistividade Hall (3.11) é um fenômeno universal, isto é, não depende de propriedades particulares da amostra, tais como geometria, materiais hospedeiros usados para fabricar o gás de elétrons 2D e, ainda mais importante, da concentração ou distribuição de impurezas⁴. Esta universalidade é a razão para a enorme precisão da resistência Hall quantizada (da ordem de 10^{-9}), sendo usada, desde 1990, como a resistência padrão⁵,

$$R_{K-90} = \frac{h}{e^2} = 25812.807\Omega, \quad (3.12)$$

a qual é atualmente chamada de constante de Klitzing [29].

3.3 Efeito Hall quântico fracionário

Três anos após a descoberta do EHQI, outro efeito ainda mais impressionante foi observado nos SE2DC de melhor qualidade (maior mobilidade dos portadores de carga): o efeito Hall quântico fracionário (EHQF). Como o próprio nome sugere, ao contrário do EHQI, onde o número N na Eq. (3.11) é um inteiro, a quantização da resistividade Hall, descoberta por Tsui, Störmer e Gossard, foi observada para um número fracionário, mais especificamente para $N = 1/3$ [27]. Em ambos os efeitos a resistência longitudinal vai a zero quando a resistência Hall é quantizada (Fig. 3.2). Porém, as origens desses efeitos

³O número N determina o preenchimento dos níveis de Landau, usualmente descrito pela letra grega ν (fator de preenchimento).

⁴Na Fig. 3.2 notamos que nos platôs a resistividade longitudinal é nula, indicando que o tempo de espalhamento tende ao infinito no EHQI. Esta é outra indicação da universalidade deste efeito, ou seja, o EHQI não depende de um arranjo particular de impurezas.

⁵O subscripto K é em homenagem a K. von Klitzing e 90 refere-se ao ano de padronização da unidade de resistência.

são completamente diferentes: enquanto o EHQI pode ser entendido a partir da quantização da energia cinética dos elétrons independentes em um campo magnético (quantização de Landau), o EHQF é devido às fortes correlações eletrônicas, quando um nível de Landau está apenas parcialmente preenchido e as interações de Coulomb entre os elétrons tornam-se relevantes. De fato, em 1983 Laughlin mostrou que a origem do EHQF com $N = 1/3$, bem como para qualquer $N = 1/Q$, com Q sendo um inteiro ímpar, é devido à formação de um líquido eletrônico incompressível correlacionável, com propriedades extremamente exóticas [28].

Após a descoberta do EHQF para $N = 1/3$, uma grande variedade de outros tipos de EHQF tem sido descobertos e teoricamente descritos. Por exemplo, os casos $N = 2/5$ e $N = 3/7$, os quais pertencem à série $P/(2QP \pm 1)$, onde P e Q são inteiros, possui uma interpretação convincente dentro da teoria dos compostos de férmions (CFs), de acordo com a qual o EHQF pode ser visualizado como um EHQI de uma nova quasi-partícula consistindo de um elétron que captura um número par de *fluxo quanta* [30]. Outro interessante caso de EHQF foi descoberto em 1987 por Willett *et al.*, para $N = 5/2$ e $N = 7/2$ [31]. Até então, apenas estados $N = P/Q$ com denominadores ímpares haviam sido observados. Este tipo de EHQF foi descrito teoricamente em 1991 por Moore e Read [32] e por Greiter *et al.* [33], em termos de funções de onda muito particulares chamadas *Pfaffian*, envolvendo excitações de quasi-partículas com estatística não Abelianas. Por fim, mencionamos um tipo de EHQF com $N = 4/11$ e $N = 5/13$, descoberto em 2003 por Pan *et al.* [34]⁶. Estas sequências de frações não se ajustam muito bem às séries de EHQI dos CFs citados acima. Não obstante, podem ser consideradas como o EHQF dos CFs para interações residuais entre esses compostos de partículas.

⁶Também foram observados estados mais fracos com $N = 6/17, 4/13, 5/17$ e $7/11$.

3.4 Efeito Hall quântico relativístico

Um outro efeito Hall quântico ainda mais impressionante foi descoberto em 2005 por Novoselov *et al.* [11] e Zhang *et al.* [12]. Trata-se do EHQR no grafeno, onde os portadores de carga comportam-se como partículas relativísticas sem massa. Como consequência, a quantização de Landau da energia cinética dos elétrons no grafeno difere sobremaneira daquela obtida nos SE2DC (não relativístico), conforme discutiremos no próximo capítulo. No grafeno, o efeito Hall quântico possui uma série não usual para os platôs Hall. Em vez dos platôs com quantização da resistência dada por $R_H = \frac{h}{e^2\nu}$, onde $\nu = N$, encontram-se platôs com $\nu = \pm 2(2N + 1)$, onde N é um inteiro denotando o último nível de Landau ocupado, com fatores de preenchimento $\nu = \pm 2, \pm 6, \pm 10, \dots$. Os sinais \pm indicam os dois diferentes tipos de portadores, elétrons na banda de condução e buracos na banda de valência.

Platôs Hall com fatores de preenchimento $\nu = 0$, $\nu = \pm 1$ e $\nu = \pm 4$ foram observados por Zhang *et al.* [35], indicando o surgimento dos estados Hall quântico quadruplamente degenerados em $\nu = \pm 2(2N + 1)$. Por fim, destacamos a observação de um EHQF com $\nu = 1/3$ para o grafeno, realizada em 2009 pelos grupos Bolotin *et al.* [36] e Du *et al.* [37].

Capítulo 4

Níveis de Landau do grafeno em um campo elétrico finito

O cálculo dos níveis de Landau para o grafeno na presença de campos magnético e elétrico perpendiculares entre si foi resolvido apenas em 2007 por Lukose *et al.* [38]. Para solucionar o problema, estes pesquisadores usaram a técnica de "empurrão de Lorentz"¹, isto é, uma transformação de Lorentz que não envolve rotação sobre o sistema de referência do laboratório, implicando um referencial de Lorentz onde o campo elétrico é nulo e as soluções da equação de Dirac são conhecidas. Depois, basta aplicar a transformação inversa para se obter as autofunções e autoenergias em um campo elétrico diferente de zero. Os resultados teóricos deste trabalho foram notáveis, pois demonstraram um novo fenômeno associado aos férmions de Dirac no grafeno: o colapso dos níveis de Landau quando a razão entre os campos elétrico e magnético se aproxima de um determinado valor crítico. No mesmo ano, Peres e Castro [39] chegaram aos mesmos resultados, porém diagonalizando diretamente o Hamiltoniano de Dirac.

Este capítulo é dedicado à solução da equação relativística de Dirac², isto é, cálculo das funções de onda e níveis de energia do Hamiltoniano de Dirac, considerando o

¹Literalmente traduzido do inglês *Lorentz boost*.

²Seguimos a mesma linha de raciocínio proposta por N. M. R. Peres e E. V. Castro [39].

seguinte caso: sistema bidimensional composto por um elétron na presença de um campo magnético perpendicular e um campo elétrico finito paralelo ao plano. Na seção (4.1) formulamos o problema que iremos resolver; na seção (4.2) apresentamos o método de diagonalização do Hamiltoniano, usando a técnica de segunda quantização; na seção (4.3) resolvemos o problema sem campo elétrico; e na seção (4.4) resolvemos para um campo elétrico finito.

4.1 Formulação do problema

Partindo-se da equação de Dirac dependente do tempo para uma partícula que se move no plano (x, y) ,

$$v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (4.1)$$

onde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ são as matrizes de Pauli e $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ é o operador momento na representação da posição, $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$, consideraremos soluções de estados estacionários, isto é, tais que $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\epsilon t/\hbar}$. Desta forma, a equação de Dirac transforma-se no problema de autovalor,

$$v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi(\mathbf{r}) = \epsilon \psi(\mathbf{r}). \quad (4.2)$$

A fim de se descrever o movimento dos elétrons em um campo magnético, precisamos substituir o operador momento pela sua forma invariante de calibre $\mathbf{p} \longrightarrow \boldsymbol{\Pi} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r})$, conhecida como substituição de Peierls [40], onde q é a carga da partícula (como estamos lidando com elétrons, façamos $q = -e$, com $e > 0$) e $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ é o potencial vetor que dá origem ao campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Para que \mathbf{B} tenha uma direção perpendicular ao nosso sistema bidimensional, podemos escolher o calibre de Landau [41], isto é, $\mathbf{A} = B(-y, 0)$.

Agora vamos incluir um campo elétrico uniforme $\mathbf{E} = (0, E)$ orientado na direção do eixo y . Então, devemos adicionar o termo $eEy\mathbf{1}$ ao Hamiltoniano, onde $\mathbf{1}$ é a matriz unitária 2×2 .

Assim, o problema de uma camada de grafeno na presença de um campo magnético perpendicular e de um campo elétrico paralelo ao plano tem seu Hamiltoniano dado por, $H_0 = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})] + eEy\mathbf{1}$, ou

$$H_0 = v_F \begin{pmatrix} eEy/v_F & p_x - eBy - ip_y \\ p_x - eBy + ip_y & eEy/v_F \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Uma autofunção apropriada para o Hamiltoniano acima pode ser escrita na forma,

$$\psi(x, y) = e^{ik_x x} \varphi(y), \quad (4.4)$$

sugerida pela forma simétrica de H_0 com respeito às direções x e y . O autoproblema $H_0\psi(x, y) = \epsilon\psi(x, y)$ passa a ser dado por,

$$v_F \begin{pmatrix} eEy/v_F & \hbar k_x - eBy - ip_y \\ \hbar k_x - eBy + ip_y & eEy/v_F \end{pmatrix} \varphi(y) = \epsilon\varphi(y). \quad (4.5)$$

Para resolver a Eq. (4.5) é conveniente realizar a mudança de variável $y = \bar{y}l_B + l_B^2 k_x$, onde $l_B = \sqrt{\hbar/(eB)}$ é o comprimento magnético, de modo a introduzir os operadores escada

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\bar{y} + \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \right) \quad \text{e} \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\bar{y} - \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \right), \quad (4.6)$$

os quais satisfazem a relação de comutação usual $[a, a^\dagger] = 1$.

Então, podemos reescrever a Eq. (4.5) em termos dos operadores aniquilação e criação (4.6),

$$\begin{pmatrix} E_B (a + a^\dagger) + eEl_B^2 k_x & E_A a \\ E_A a^\dagger & E_B (a + a^\dagger) + eEl_B^2 k_x \end{pmatrix} \varphi(y) = \epsilon\varphi(y), \quad (4.7)$$

onde definimos $E_A = -\sqrt{2}v_F\hbar/l_B$ e $E_B = eEl_B/\sqrt{2}$. A partir dessas considerações o

problema a ser resolvido passa a ser

$$\begin{pmatrix} E_B (a + a^\dagger) & E_A a \\ E_A a^\dagger & E_B (a + a^\dagger) \end{pmatrix} \varphi(y) = \epsilon' \varphi(y), \quad (4.8)$$

onde $\epsilon' = \epsilon - eEl_B^2 k_x$. Então, o Hamiltoniano a ser diagonalizado é

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_B (a + a^\dagger) & E_A a \\ E_A a^\dagger & E_B (a + a^\dagger) \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Porque \mathcal{H} é uma matriz 2×2 , os autoestados $\varphi(y)$ são vetores 2-*spinors*,

$$\varphi(y) = \begin{pmatrix} u(y) \\ v(y) \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

4.2 Método de diagonalização do Hamiltoniano

A estratégia para diagonalizar \mathcal{H} consiste em definirmos um operador auxiliar $\bar{\mathcal{H}}$ que satisfaça a seguinte propriedade [39]:

$$\mu (\bar{\mathcal{H}} + \mathcal{H}) + \nu \bar{\mathcal{H}} \mathcal{H} = J\mathbf{1} + \mathbf{K}, \quad (4.11)$$

para algum operador simples J (não uma matriz cujos elementos são operadores), alguma matriz real 2×2 \mathbf{K} , e reais μ e ν .

Aplicando ambos os membros de (4.11) no autoestado $|\varphi\rangle$ de \mathcal{H} , obtemos,

$$[\mu (\bar{\mathcal{H}} + \mathcal{H}) + \nu \bar{\mathcal{H}} \mathcal{H}] |\varphi\rangle = [\mu (\bar{\mathcal{H}} + \epsilon') \nu \bar{\mathcal{H}} \epsilon'] |\varphi\rangle = (\mu \epsilon' + \mu \bar{\mathcal{H}} + \nu \epsilon' \bar{\mathcal{H}}) |\varphi\rangle. \quad (4.12)$$

Escolhendo os valores $\mu = \epsilon'$ e $\nu = -1$, o problema se reduz à solução da equação equivalente

$$(J\mathbf{1} + \mathbf{K}) |\varphi\rangle = \epsilon'^2 |\varphi\rangle. \quad (4.13)$$

Neste caso, $|\varphi\rangle$ também é um autoestado de $J\mathbf{1} + \mathbf{K}$ com autovalor ϵ'^2 . O *spinor* $|\varphi\rangle$ fica melhor representado sob a forma

$$|\varphi\rangle = |j\rangle \chi, \quad (4.14)$$

onde $|j\rangle$ é um autovetor do operador J e o *spinor* χ é um autovetor da matriz \mathbf{K} ,

$$J|j\rangle = j|j\rangle \quad \text{e} \quad \mathbf{K}\chi = \lambda\chi. \quad (4.15)$$

Contudo, ainda falta determinar $\bar{\mathcal{H}}$. Uma escolha apropriada para $\bar{\mathcal{H}}$ é³

$$\bar{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} E_B(a + a^\dagger) & -E_A a \\ -E_A a^\dagger & E_B(a + a^\dagger) \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

De fato, temos que

$$\begin{aligned} \epsilon' (\bar{\mathcal{H}} + \mathcal{H}) - \bar{\mathcal{H}}\mathcal{H} &= [(E_A^2 - 2E_B^2)N - E_B^2(aa + a^\dagger a^\dagger) + 2\epsilon' E_B(a + a^\dagger)] \mathbf{1} \\ &+ \begin{pmatrix} E_A^2 - E_B^2 & E_A E_B \\ -E_A E_B & -E_B^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.17)$$

onde $N = a^\dagger a$ é o operador número. Segue que o operador J e a matriz \mathbf{K} ficam determinados:

$$J = (E_A^2 - 2E_B^2)N - E_B^2(aa + a^\dagger a^\dagger) + 2\epsilon' E_B(a + a^\dagger) \quad (4.18)$$

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} E_A^2 - E_B^2 & E_A E_B \\ -E_A E_B & -E_B^2 \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

³Repare que tomamos $\bar{\mathcal{H}} = \sigma_z \mathcal{H} \sigma_z$.

4.3 Campo elétrico nulo

Na ausência de campo elétrico, temos $E = E_B = 0$ e $\epsilon' = \epsilon$. Como consequência o operador J em (4.18) já está na forma diagonal, cujo espectro é similar ao do oscilador harmônico unidimensional, isto é,

$$J|n\rangle = E_A^2 n |n\rangle. \quad (4.20)$$

No que se refere à diagonalização da matriz \mathbf{K} , a solução também é trivial, fornecendo os autovalores $\lambda_1 = E_A^2$ e $\lambda_2 = 0$, com os respectivos autovetores:

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } \chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Retornando à Eq. (4.13), vemos facilmente que

$$\epsilon_{n,\lambda}^2 = E_A^2 n + \lambda \implies \epsilon_{n,\lambda_1}^2 = E_A^2 (n + 1) \text{ e } \epsilon_{n,\lambda_2}^2 = E_A^2 n. \quad (4.22)$$

As Eqs. (4.22) possuem duas soluções, uma positiva e outra negativa, de modo que precisamos introduzir um outro número quântico $\kappa = \pm$, associado aos estados de energia positiva e negativa, respectivamente. Este número quântico desempenha o mesmo papel do índice de banda ($\kappa = +$ para a banda de condução e $\kappa = -$ para a banda de valência). Assim, obtemos as autoenergias do Hamiltoniano \mathcal{H} (e consequentemente do Hamiltoniano H_0) para o caso em que o campo elétrico é nulo:

$$\epsilon_{n,\kappa} = \kappa E_A \sqrt{n} \implies \epsilon_{n,\kappa} = \kappa \frac{\hbar v_F}{l_B} \sqrt{2n}, \quad (4.23)$$

onde $n = 1, 2, 3, \dots$. Repare nas Eqs. (4.22) que $\epsilon_{n-1,\lambda_1}^2 = \epsilon_{n,\lambda_2}^2 = E_A^2 n$, resultando em autovalores $\epsilon_{n,\lambda}^2$ duplamente degenerados. Portanto, os autoestados $|\varphi\rangle$ consistem da

combinação linear desses autoestados degenerados,

$$|\varphi\rangle_{n,\kappa} = |n-1\rangle \chi_1 + \kappa |n\rangle \chi_2 = \begin{pmatrix} |n-1\rangle \\ \kappa |n\rangle \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Apenas o estado fundamental $n = 0$ é não-degenerado, pois é o único estado de energia zero, isto é, $\epsilon_0 = 0$,

$$|\varphi\rangle_0 = |0\rangle \chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

4.4 Campo elétrico finito

Com a análise anterior em mente, procedemos com a diagonalização do nosso problema definido pela Eq. (4.13), para o caso em que o campo elétrico é diferente de zero. Iniciamos resolvendo a Eq. (4.19), cujos autovalores são dados por,

$$\det(\mathbf{K} - \lambda \mathbf{1}) = \mathbf{0} \implies \quad (4.26)$$

$$\lambda_1 = -E_B^2 + \frac{1}{2} \left(E_A^2 + E_A \sqrt{E_A^2 - 4E_B^2} \right) \text{ e } \lambda_2 = -E_B^2 + \frac{1}{2} \left(E_A^2 - E_A \sqrt{E_A^2 - 4E_B^2} \right). \quad (4.27)$$

Um cálculo simples, porém tedioso, permite-nos obter os autovetores normalizados associados com λ_1 e λ_2 ,

$$\chi_1 = \sqrt{\left| \frac{E_B}{E_A} \right|} \begin{pmatrix} -\sqrt{C_1} \\ \sqrt{C_2} \end{pmatrix} \text{ e } \chi_2 = \sqrt{\left| \frac{E_B}{E_A} \right|} \begin{pmatrix} -\sqrt{C_2} \\ \sqrt{C_1} \end{pmatrix}, \quad (4.28)$$

com

$$C_1 = \frac{1}{2} \left(\left| \frac{E_A}{E_B} \right| + \sqrt{\frac{E_A^2}{E_B^2} - 4} \right) \text{ e } C_2 = \frac{1}{2} \left(\left| \frac{E_A}{E_B} \right| - \sqrt{\frac{E_A^2}{E_B^2} - 4} \right). \quad (4.29)$$

Dos autovalores da matriz \mathbf{K} (4.27), vemos que E_A e E_B devem satisfazer a relação

$$|E_A| \geq 2E_B, \quad (4.30)$$

uma vez que os autovalores devem ser necessariamente reais. O significado desta desigualdade será discutido mais tarde.

Tendo resolvido a Eq. (4.19), resta-nos pensar na equação

$$J|\varphi\rangle = (\epsilon'^2 - \lambda)|\varphi\rangle. \quad (4.31)$$

Primeiro de tudo, vamos escrever o operador J como a soma de dois outros operadores, $J_1 + J_2$, dados por

$$J_1 = (E_A^2 - 2E_B^2)N - E_B^2(aa + a^\dagger a^\dagger) \quad (4.32)$$

$$J_2 = 2\epsilon' E_B(a + a^\dagger). \quad (4.33)$$

O operador J_1 pode ser diagonalizado usando-se a transformação

$$a = \gamma \cosh U - \gamma^\dagger \sinh U, \quad (4.34)$$

onde os operadores γ e γ^\dagger satisfazem a relação de comutação usual $[\gamma, \gamma^\dagger] = 1$. Substituindo (4.34) em (4.32), obtemos

$$\begin{aligned} J_1 &= (E_A^2 - 2E_B^2) \sinh^2 U + 2E_B^2 \cosh U \sinh U \\ &- [(E_A^2 - 2E_B^2) \cosh U \sinh U + E_B^2 (\cosh^2 U + \sinh^2 U)] (\gamma^\dagger \gamma^\dagger + \gamma \gamma) \\ &+ [(E_A^2 - 2E_B^2) (\cosh^2 U + \sinh^2 U) + 4E_B^2 \cosh U \sinh U] \gamma^\dagger \gamma. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Para que J_1 seja diagonal é necessário que $(E_A^2 - 2E_B^2) \cosh U \sinh U + E_B^2 (\cosh^2 U + \sinh^2 U) = 0$, isto é

$$(E_A^2 - 2E_B^2) \sinh 2U + 2E_B^2 \cosh 2U = 0. \quad (4.36)$$

Usando a identidade $\cosh^2 2U - \sinh^2 2U = 1$, verificamos que

$$\sinh 2U = -2E_B^2/\xi \quad (4.37)$$

$$\cosh 2U = (E_A^2 - 2E_B^2)/\xi, \quad (4.38)$$

onde $\xi = \sqrt{E_A^4 - 4E_A^2 E_B^2}$. Substituindo (4.37) e (4.38) em (4.35), segue que

$$J_1 = \frac{1}{2} [\xi - (E_A^2 - 2E_B^2)] + \xi \gamma^\dagger \gamma = \xi_1 + \xi \gamma^\dagger \gamma, \quad (4.39)$$

com $\xi_1 = \frac{1}{2} [\xi - (E_A^2 - 2E_B^2)]$. O operador J_2 escrito em termos dos operadores γ^\dagger e γ assume a forma

$$J_2 = 2\epsilon' E_B (\cosh U - \sinh U) (\gamma^\dagger + \gamma) = \xi_2 (\gamma^\dagger + \gamma), \quad (4.40)$$

com $\xi_2 = 2\epsilon' E_B (\cosh U - \sinh U)$.

Agora note que a transformação $\gamma^\dagger = \beta^\dagger - \xi_2/\xi$ leva $J_1 + J_2$ a

$$\begin{aligned} J &= J_1 + J_2 = \xi_1 + \xi \left(\beta^\dagger - \frac{\xi_2}{\xi} \right) \left(\beta - \frac{\xi_2}{\xi} \right) + \xi_2 \left(\beta^\dagger - \frac{\xi_2}{\xi} + \beta - \frac{\xi_2}{\xi} \right) \\ &= \xi_1 + \xi \left(\beta^\dagger \beta - \frac{\xi_2}{\xi} \beta^\dagger - \frac{\xi_2}{\xi} \beta + \frac{\xi_2^2}{\xi^2} \right) + \xi_2 (\beta^\dagger + \beta) - \frac{2\xi_2^2}{\xi} = \xi_1 - \frac{\xi_2^2}{\xi} + \xi \beta^\dagger \beta, \end{aligned} \quad (4.41)$$

que possui a forma diagonal desejada. Agora, o espectro de energia do operador J é trivial,

$$j_n = \xi_1 - \frac{\xi_2^2}{\xi} + \xi n = \frac{1}{2} [\xi - (E_A^2 - 2E_B^2)] - \frac{4\epsilon'^2 E_B^2 E_A^2}{\xi^2} + \xi n, \quad (4.42)$$

onde usamos $\xi_2^2 = 4\epsilon'^2 E_B^2 E_A^2/\xi$.

Os autovalores ϵ'^2 do problema definido pela Eq. (4.13) são obtidos de $\epsilon'^2_{n,\lambda} - \lambda = j_n$, conforme a Eq. (4.31), levando a

$$\begin{aligned} \epsilon'^2_{n,\lambda} &= -E_B^2 + \frac{1}{2} \left(E_A^2 \pm E_A \sqrt{E_A^2 - 4E_B^2} \right) + \frac{1}{2} [\xi - (E_A^2 - 2E_B^2)] - \frac{4\epsilon'^2_{n,\lambda} E_B^2 E_A^2}{\xi^2} + \xi n \\ &\implies \left(1 + \frac{4E_B^2 E_A^2}{\xi^2} \right) \epsilon'^2_{n,\lambda} = -E_B^2 + \frac{E_A^2}{2} \pm \frac{\xi}{2} + \frac{\xi}{2} - \frac{E_A^2}{2} + E_B^2 + \xi n \\ &\implies \epsilon'^2_{n,\lambda} = \frac{\xi^3}{E_A^4} \left[n + \frac{1}{2} (1 \pm 1) \right]. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Na solução (4.43), $\lambda = \lambda_1$ para o sinal positivo e $\lambda = \lambda_2$ para o sinal negativo. Mais uma vez identificamos a dupla degenerescência $\epsilon'_{n-1,\lambda_1} = \epsilon'_{n,\lambda_2} = \frac{\xi^3}{E_A^4}n$, além do único nível não degenerado $\epsilon'_{0,\lambda_2} = 0$. Os autovalores da Eq. (4.9) são dados por

$$\epsilon'_0 = 0 \quad (4.44)$$

$$\epsilon'_{n,\kappa} = \kappa E_A \left(1 - \frac{4E_B^2}{E_A^2}\right)^{3/4} \sqrt{n}, \quad (4.45)$$

donde finalmente se obtém os autovalores ϵ do problema original dado pela Eq. (4.5) (lembrando que $\epsilon' = \epsilon - eEl_B^2 k_x$),

$$\epsilon_0 = eEl_B^2 k_x \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_{n,\kappa}(k_x) &= eEl_B^2 k_x + \kappa E_A \left(1 - \frac{4E_B^2}{E_A^2}\right)^{3/4} \sqrt{n} \\ \implies \epsilon_{n,\kappa}(k_x) &= eEl_B^2 k_x + \kappa \frac{\hbar v_F}{l_B} (1 - \eta^2)^{3/4} \sqrt{2n}, \end{aligned} \quad (4.47)$$

onde $n = 1, 2, 3, \dots$, $\eta = \frac{E}{v_F B}$ é um parâmetro adimensional dependente do campo elétrico. Os respectivos autovetores são dados por,

$$|\varphi\rangle_0 = |0; \beta\rangle \chi_2 = \sqrt{\left|\frac{E_B}{E_A}\right|} \begin{pmatrix} -\sqrt{C_2} \\ \sqrt{C_1} \end{pmatrix} |0; \beta\rangle \quad (4.48)$$

$$|\varphi\rangle_{n,\kappa} = |n-1; \beta\rangle \chi_1 + \kappa |n; \beta\rangle \chi_2 = \sqrt{\left|\frac{E_B}{E_A}\right|} \begin{pmatrix} -|n-1; \beta\rangle \sqrt{C_1} - \kappa |n; \beta\rangle \sqrt{C_2} \\ |n-1; \beta\rangle \sqrt{C_2} + \kappa |n; \beta\rangle \sqrt{C_1} \end{pmatrix}. \quad (4.49)$$

No espaço de Hilbert, as autofunções são escritas da seguinte forma,

$$\psi_{n,k_x}^\kappa(x, y) = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x}} \sqrt{\frac{\eta}{4}} \left(\sqrt{C_2} \Phi_n(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)) - \kappa \sqrt{C_1} \Phi_{n-1}(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)) \right), \quad (4.50)$$

para $n = 1, 2, 3, \dots$, e

$$\psi_{0,k_x}(x, y) = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x}} \sqrt{\frac{\eta}{2}} \left(\frac{\sqrt{C_2}}{\sqrt{C_1}} \right) \Phi_0(\tilde{y}_{0,k_x}(y)), \quad (4.51)$$

para $n = 0$; podemos reescrever C_1 e C_2 em termos do parâmetro η , por exemplo, $C_1 = (1 + \sqrt{1 - \eta^2})/\eta$ e $C_2 = (1 - \sqrt{1 - \eta^2})/\eta$. Em (4.50) e (4.51), $\Phi_n(\tilde{y})$ são as usuais funções normalizadas do oscilador harmônico, e

$$\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y) = (1 - \eta^2)^{1/4} [y - y_0^{n,\kappa}(k_x)], \quad (4.52)$$

onde $y_0^{n,\kappa}(k_x) = l_B^2 k_x - \kappa l_B \eta (1 - \eta^2)^{-1/4} \sqrt{2n}$ é o centro do oscilador harmônico. No Apêndice A exibimos explicitamente as funções $\Phi_n(\tilde{y}(y))$.

Analogamente à seção anterior, onde consideramos o caso de campo elétrico nulo, o número quântico κ se refere às bandas de condução e de valência. Repare também que as soluções desta seção somente são válidas para $\eta \leq 1$.

4.5 Comentários adicionais

Um gás de elétrons padrão bidimensional⁴, submetido a um campo magnético perpendicular, tem um espectro de energia dado por [42]

$$\epsilon_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.53)$$

em completa analogia com o oscilador harmônico quântico, onde $\omega_c = eB/m$ é a frequência ciclotrônica para os elétrons com massa m . Os níveis de Landau são igualmente espaçados com uma separação $\hbar\omega_c$, que aumenta linearmente com B . A introdução de

⁴Entende-se por um gás de elétrons padrão um sistema cujo Hamiltoniano é essencialmente não relativístico.

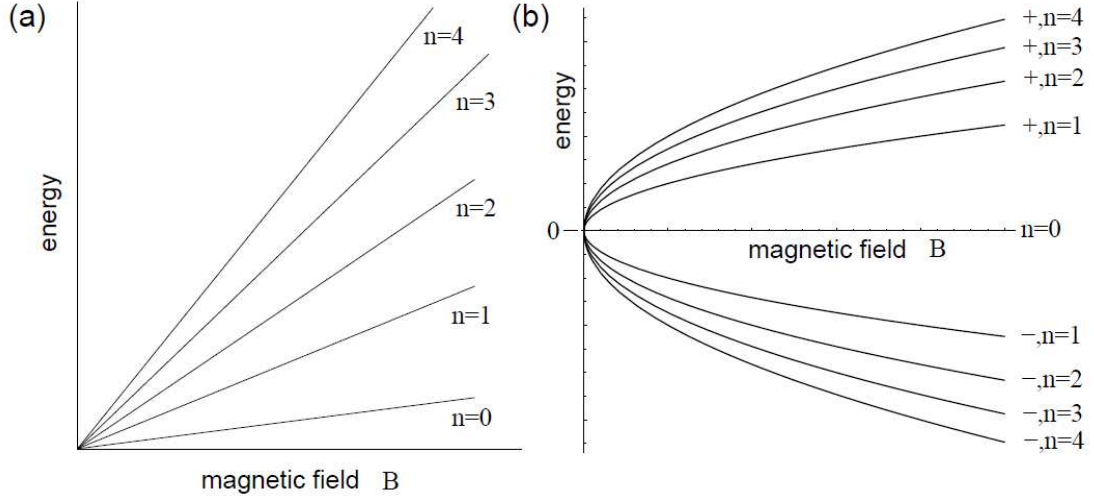


Figura 4.1: Níveis de Landau como função do campo magnético. (a) Caso não relativístico com $\epsilon_n = \hbar\omega_c(n + 1/2) \propto B(n + 1/2)$. (b) Caso relativístico com $\epsilon_{n,\kappa} = \kappa(\hbar v_F/l_B)\sqrt{2n} \propto \kappa\sqrt{Bn}$ [43].

um campo elétrico E paralelo ao plano desloca o espectro total,

$$\epsilon_n = -\hbar k_x \frac{E}{B} - \frac{m}{2} \left(\frac{E}{B} \right)^2 + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.54)$$

sem alteração para a frequência ciclotrônica.

No grafeno, os níveis de Landau mudam drasticamente. Conforme mencionado na Seção 4.3, o espectro em um campo magnético perpendicular é dado por,

$$\epsilon_{n,\kappa} = \kappa\hbar\bar{\omega}_c\sqrt{n} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.55)$$

onde a frequência ciclotrônica relativística é $\bar{\omega}_c = \sqrt{2}v_F/l_B$. Comparando (4.53) com (4.55) percebemos duas grandes diferenças: primeiro, o espaçamento dos níveis de Landau no grafeno não é constante; segundo, o gás padrão tem $\omega_c \propto B$, enquanto no grafeno $\bar{\omega}_c \propto \sqrt{B}$ (Fig. 4.1).

Quando da presença de um campo elétrico paralelo ao plano e de um campo magnético

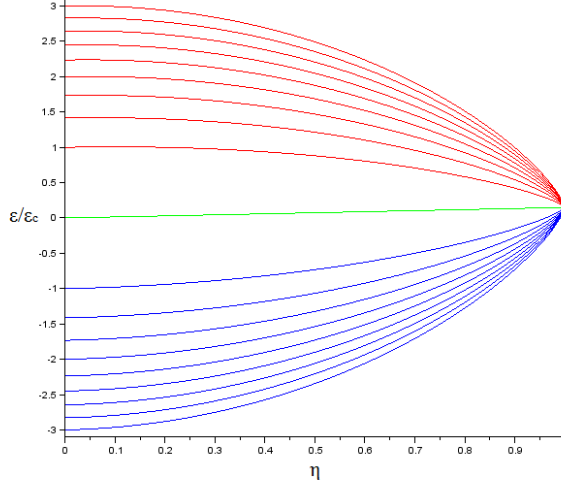


Figura 4.2: Primeiros dezenove níveis de Landau normalizados pela energia ciclotrônica $\epsilon_c = \hbar\bar{\omega}_c$, em função do parâmetro $\eta = E/v_F B$. O valor do momento k_x foi tomado igual a zero. O campo magnético é igual a $B = 27$ Tesla.

perpendicular no grafeno, os níveis de Landau são dados por (4.47), que podem ser escritos sob a forma,

$$\epsilon_{n,\kappa}(k_x) = eEl_B^2 k_x + \kappa \hbar \Omega_c \sqrt{n} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.56)$$

onde a frequência ciclotrônica agora é dada por

$$\Omega_c = \bar{\omega}_c (1 - \eta^2)^{3/4}. \quad (4.57)$$

Comparando (4.54) e (4.56), observamos que a principal diferença entre esses autovalores, além da dependência \sqrt{n} e \sqrt{B} , é que o espaçamento dos níveis de Landau no grafeno são escalados por $(1 - \eta^2)^{3/4}$, enquanto o espaçamento é independente do campo elétrico para o caso não relativístico. Comparando as autofunções com e sem campo elétrico (4.24) e (4.50), vemos que o efeito do campo elétrico é comprimir/esticar os es-

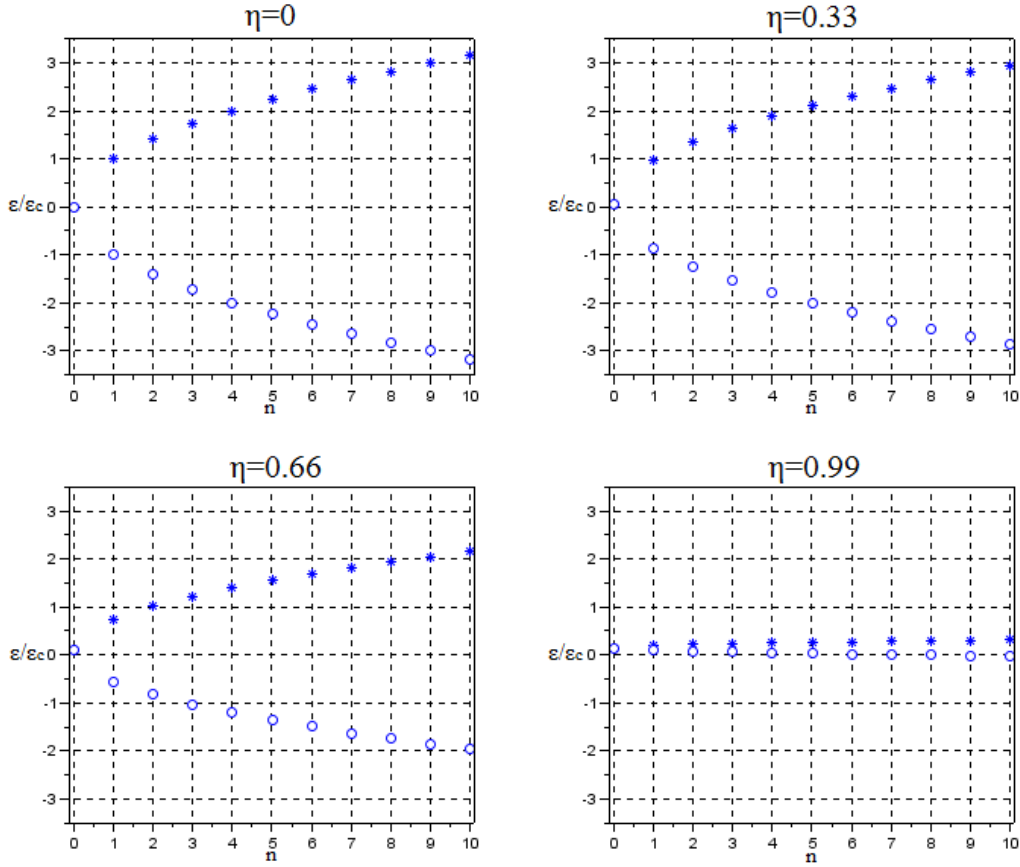


Figura 4.3: Níveis de Landau normalizados pela energia ciclotrônica ϵ_c , em função do número quântico n . $k_x = 2\pi/600a'$, onde $a' = a\sqrt{3} = 2.456 \text{ \AA}$ é o espaçamento da rede triangular. O campo magnético é igual a $B = 27$ Tesla.

tados do oscilador, bem como misturar as funções de onda de partículas e buracos (as autofunções na Eq. (4.50) podem ser expandidas como uma superposição dos estados na Eq. (4.24)). Assim, diferentemente das amostras usuais semicondutoras, no grafeno o campo elétrico causa a mistura dos níveis de Landau. Essas diferenças são consequência direta da natureza relativística dos elétrons no grafeno.

O mais interessante que ainda nos resta discutir é o fato de que $\eta \leq 1$ deve ser satisfeito para que a frequência ciclotrônica Ω_c , e consequentemente as autoenergias $\epsilon_{n,\kappa}$, sejam reais. Esta desigualdade é exatamente o que expressa a Eq. (4.30). Quando E

se aproxima de $v_F B$ (por baixo), Ω_c torna-se cada vez menor, e os níveis de Landau se aproximam mais e mais uns dos outros. Eventualmente, quando $E = v_F B$, que implica $\Omega_c = 0$, temos um conseqüente colapso dos níveis de Landau. Na Fig. 4.2 são mostrados os dezenove primeiros níveis de Landau, para energias positivas e negativas, como função do parâmetro η . Na Fig. 4.3, iniciando pela figura superior à esquerda, onde $\eta = 0$, seguindo no sentido horário, em que η é incrementado de 0.33, novamente observamos o estreitamento dos níveis de Landau à medida que η se aproxima de 1. Repare também na Fig. 4.3 que para $\eta = 0.99$ alguns estados de buracos possuem energias positivas⁵, demonstrando uma sucessiva assimetria dos níveis de Landau à medida que η tende a 1. Naturalmente que este comportamento somente ocorre, para o caso em que o campo elétrico é diferente de zero, quando tomamos valores de momento k_x não nulos⁶.

⁵Este comportamento anômalo, em que elétrons e buracos possuem energias positivas, evidencia a mistura das suas funções de onda, bem como dos seus espectros de energia. Fixando B e η , é fácil demonstrar que o número quântico n dos buracos com energias positivas deve satisfazer $n < n_{bp} = \frac{l_B^2 k_x^2 \eta^2}{2(1-\eta^2)^{3/2}}$. Na Fig. 4.3, para o caso em que $\eta = 0.99$, os sete primeiros níveis de buracos são positivos, pois $n_{bp} \approx 7.74$.

⁶Quando o campo elétrico é nulo, os níveis de Landau são sempre simétricos.

Capítulo 5

Fluxos dissipativos e não dissipativos no grafeno

Neste capítulo vamos calcular a densidade de corrente dissipativa para uma lâmina plana de grafeno (de comprimento $L_x \rightarrow \infty$ e largura $L_y \rightarrow \infty$, de modo que quaisquer efeitos de borda podem ser desprezados) na presença de um forte campo magnético $\mathbf{B} = B\hat{z}$ e de um campo elétrico finito $\mathbf{E} = -E\hat{y}$ (mesmas condições do capítulo anterior). Assumimos que o principal mecanismo de espalhamento é devido à interação elétron-fônon.

Na representação de segunda quantização, o Hamiltoniano do nosso problema é dado por

$$H = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + \sum_{\mathbf{q}; j=L,T} \hbar\omega_{\mathbf{q}}^j b_{\mathbf{q}}^{j\dagger} b_{\mathbf{q}}^j + \sum_{j=L,T} H_{ep}^j, \quad (5.1)$$

onde a_{α}^{\dagger} , a_{α} e $b_{\mathbf{q}}^{j\dagger}$, $b_{\mathbf{q}}^j$ são os operadores criação e aniquilação de elétrons e fônons, respectivamente; ϵ_{α} é a energia de um elétron no estado $|\alpha\rangle = |n, k_x, \kappa\rangle$, isto é, são os autovalores e autovetores da equação $H_0 |\alpha\rangle = \epsilon_{\alpha} |\alpha\rangle$, resolvida na Seção 4.4.

Consideramos apenas os modos de vibração no plano (longitudinal $j = L$ e transversal $j = T$). O termo de interação elétron-fônon H_{ep}^j segue das Refs. [21] e [44],

$$H_{ep}^j = \theta(t - \Delta t) \sum_{\alpha\alpha'; \mathbf{q}} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha'} \left(b_{\mathbf{q}}^j + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger} \right) \langle \alpha | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_{\mathbf{q}}^j | \alpha' \rangle, \quad (5.2)$$

onde $\theta(t) = 1$ e 0 para $t > 0$ e $t < 0$, respectivamente; $\Delta t > 0$ finito (repare que a interação entre elétrons e fônons inicia em $t = \Delta t$). As constantes de interação elétron-fônon são dadas pelas matrizes abaixo

$$C_{\mathbf{q}}^L = iq \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}^L A}} \begin{pmatrix} g_1 & -ig_2 e^{2i\varphi} \\ ig_2 e^{-2i\varphi} & g_1 \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

$$C_{\mathbf{q}}^T = iq \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}^T A}} \begin{pmatrix} 0 & g_2 e^{2i\varphi} \\ g_2 e^{-2i\varphi} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

onde as constantes de potencial de deformação e de acoplamento são respectivamente estimadas como $g_1 \approx 20 - 30eV$ e $g_2 \approx 1.52eV$ [45], [46] e [47]; $A = L_x L_y$. Aqui $\omega_{\mathbf{q}}^L = s_L q$, $\omega_{\mathbf{q}}^T = s_T q$, $\rho = 7.6 \times 10^{-8} g/cm^2$ é a densidade de massa; $s_L \approx 2.1 \times 10^6 cm/s$ e $s_T \approx 1.4 \times 10^6 cm/s$ são valores típicos para o grafeno [44]; φ é o ângulo entre o vetor de onda \mathbf{q} e o eixo x .

5.1 Equações de movimento de elétrons e fônons

As equações de movimento para os operadores de elétrons e fônons são dadas por

$$i\hbar \frac{\partial a_{\alpha}}{\partial t} = [a_{\alpha}, H] - \frac{i\hbar}{\tau_1} (a_{\alpha} - a_{\alpha}^{(0)}(t)) \quad (5.5)$$

$$i\hbar \frac{\partial a_{\alpha}^{\dagger}}{\partial t} = [a_{\alpha}^{\dagger}, H] - \frac{i\hbar}{\tau_1} (a_{\alpha}^{\dagger} - a_{\alpha}^{(0)\dagger}(t)) \quad (5.6)$$

$$i\hbar \frac{\partial b_{\mathbf{q}}^j}{\partial t} = [b_{\mathbf{q}}^j, H] - \frac{i\hbar}{\tau_2} (b_{\mathbf{q}}^j - b_{\mathbf{q}}^{j(0)}(t)) \quad (5.7)$$

$$i\hbar \frac{\partial b_{\mathbf{q}}^{j\dagger}}{\partial t} = [b_{\mathbf{q}}^{j\dagger}, H] - \frac{i\hbar}{\tau_2} (b_{\mathbf{q}}^{j\dagger} - b_{\mathbf{q}}^{j(0)\dagger}(t)). \quad (5.8)$$

Aqui, $a_{\alpha}^{(0)}(t)$ e $b_{\mathbf{q}}^{j(0)}(t)$ são os operadores aniquilação na ausência de interação, isto é, ordem zero com respeito à constante de interação $C_{\mathbf{q}}^j$. O lado direito das Eqs. (5.5)–(5.8) incluem termos infinitesimalmente pequenos, τ_1 e $\tau_2 \rightarrow \infty$, os quais garantem a independência da densidade de corrente dissipativa em relação ao tempo, condição necessária

nas discussões de problemas cinéticos [48], [49]. Calculando os comutadores,

$$[a_\alpha, H] = \epsilon_\alpha a_\alpha + \theta(t - \Delta t) \sum_{\alpha'' \mathbf{q} j} a_{\alpha''} (b_{\mathbf{q}}^j + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha''} \quad (5.9)$$

$$[a_\alpha^\dagger, H] = -\epsilon_\alpha a_\alpha^\dagger - \theta(t - \Delta t) \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} a_{\alpha'}^\dagger (b_{\mathbf{q}}^j + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha} \quad (5.10)$$

$$[b_{\mathbf{q}}^j, H] = \hbar\omega_{\mathbf{q}}^j b_{\mathbf{q}}^j + \theta(t - \Delta t) \sum_{\alpha\alpha'} a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} \quad (5.11)$$

$$[b_{\mathbf{q}}^{j\dagger}, H] = -\hbar\omega_{\mathbf{q}}^j b_{\mathbf{q}}^{j\dagger} - \theta(t - \Delta t) \sum_{\alpha\alpha'} a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'}, \quad (5.12)$$

onde $(d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} = \langle \alpha | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_{\mathbf{q}}^j | \alpha' \rangle$ é o elemento de matriz relativo à constante de interação, segue que

$$i\hbar \frac{\partial a_\alpha(t)}{\partial t} = \epsilon_\alpha a_\alpha(t) + \theta(t - \Delta t) \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} [b_{\mathbf{q}}^j(t) + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(t)] a_{\alpha'}(t) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} - \frac{i\hbar}{\tau_1} [a_\alpha(t) - a_\alpha^{(0)}(t)] \quad (5.13)$$

$$i\hbar \frac{\partial a_\alpha^\dagger(t)}{\partial t} = -\epsilon_\alpha a_\alpha^\dagger(t) - \theta(t - \Delta t) \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} [b_{\mathbf{q}}^j(t) + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(t)] a_{\alpha'}^\dagger(t) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha} - \frac{i\hbar}{\tau_1} [a_\alpha^\dagger(t) - a_\alpha^{(0)\dagger}(t)] \quad (5.14)$$

$$i\hbar \frac{\partial b_{\mathbf{q}}^j(t)}{\partial t} = \hbar\omega_{\mathbf{q}}^j b_{\mathbf{q}}^j(t) + \theta(t - \Delta t) \sum_{\alpha\alpha'} a_\alpha^\dagger(t) a_{\alpha'}(t) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} - \frac{i\hbar}{\tau_2} [b_{\mathbf{q}}^j(t) - b_{\mathbf{q}}^{j(0)}(t)] \quad (5.15)$$

$$i\hbar \frac{\partial b_{\mathbf{q}}^{j\dagger}(t)}{\partial t} = -\hbar\omega_{\mathbf{q}}^j b_{\mathbf{q}}^{j\dagger}(t) - \theta(t - \Delta t) \sum_{\alpha\alpha'} a_\alpha^\dagger(t) a_{\alpha'}(t) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} - \frac{i\hbar}{\tau_2} [b_{\mathbf{q}}^{j\dagger}(t) - b_{\mathbf{q}}^{j(0)\dagger}(t)]. \quad (5.16)$$

Aplicando a Transformada de Laplace em ambos os membros das Eqs. (5.13)–(5.16), obtemos

$$\left(\hbar\omega - \epsilon_\alpha + \frac{i\hbar}{\tau_1} \right) a_\alpha(\omega) = i\hbar a_\alpha(0) + \frac{i\hbar}{\tau_1} a_\alpha^{(0)}(\omega) + \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \int_{\Delta t}^{\infty} e^{i\omega t} [b_{\mathbf{q}}^j(t) + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(t)] a_{\alpha'}(t) dt (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} \quad (5.17)$$

$$\left(\hbar\omega + \epsilon_\alpha + \frac{i\hbar}{\tau_1} \right) a_\alpha^\dagger(\omega) = i\hbar a_\alpha^\dagger(0) + \frac{i\hbar}{\tau_1} a_\alpha^{(0)\dagger}(\omega) - \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \int_{\Delta t}^{\infty} e^{i\omega t} [b_{\mathbf{q}}^j(t) + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(t)] a_{\alpha'}^\dagger(t) dt (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha} \quad (5.18)$$

$$\left(\hbar\omega - \hbar\omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i\hbar}{\tau_2} \right) b_{\mathbf{q}}^j(\omega) = i\hbar b_{\mathbf{q}}^j(0) + \frac{i\hbar}{\tau_2} b_{\mathbf{q}}^{j(0)}(\omega) + \sum_{\alpha\alpha'} \int_{\Delta t}^{\infty} e^{i\omega t} a_\alpha^\dagger(t) a_{\alpha'}(t) dt (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} \quad (5.19)$$

$$\left(\hbar\omega + \hbar\omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i\hbar}{\tau_2} \right) b_{\mathbf{q}}^{j\dagger}(\omega) = i\hbar b_{\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) + \frac{i\hbar}{\tau_2} b_{\mathbf{q}}^{j(0)\dagger}(\omega) - \sum_{\alpha\alpha'} \int_{\Delta t}^{\infty} e^{i\omega t} a_\alpha^\dagger(t) a_{\alpha'}(t) dt (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} \quad (5.20)$$

5.2 Expansão dos operadores eletrônicos e fonônicos

Nesta seção, apresentamos a expansão dos operadores eletrônicos e fonônicos em zero, primeira e segunda ordem com respeito à constante de interação elétron-fônon. Vamos admitir que a interação elétron-fônon é "ligada" em $t = \Delta t$, de modo que a contribuição de ordem zero seja independente da constante de interação elétron-fônon. Então, no domínio da frequência, os operadores aniquilação de ordem zero são dados por

$$\left(\hbar\omega - \epsilon_\alpha + \frac{i\hbar}{\tau_1} \right) a_\alpha^{(0)}(\omega) = i\hbar a_\alpha(0) + \frac{i\hbar}{\tau_1} a_\alpha^{(0)}(\omega) \implies a_\alpha^{(0)}(\omega) = \frac{ia_\alpha(0)}{\omega - \omega_\alpha} \quad (5.21)$$

$$\left(\hbar\omega - \hbar\omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i\hbar}{\tau_2} \right) b_{\mathbf{q}}^{j(0)}(\omega) = i\hbar b_{\mathbf{q}}^j(0) + \frac{i\hbar}{\tau_2} b_{\mathbf{q}}^{j(0)}(\omega) \implies b_{\mathbf{q}}^{j(0)}(\omega) = \frac{ib_{\mathbf{q}}^j(0)}{\omega - \omega_{\mathbf{q}}^j}. \quad (5.22)$$

Aplicando a Transformada Inversa de Laplace em (5.21) e (5.22), facilmente obtemos esses operadores no domínio do tempo,

$$a_\alpha^{(0)}(t) = a_\alpha(0)e^{-i\omega_\alpha t} \quad (5.23)$$

$$b_{\mathbf{q}}^{j(0)}(t) = b_{\mathbf{q}}^j(0)e^{-i\omega_{\mathbf{q}}^j t}. \quad (5.24)$$

A fim de expandir os operadores eletrônicos e fonônicos em ordens maiores com relação à constante de interação elétron-fônon, estenderemos para o grafeno a abordagem utilizada por Balev [21] em seu cálculo da densidade de corrente dissipativa de um gás de elétrons 2D não relativístico interagindo com fônons acústicos no plano. Para ilustrar essa metodologia, vamos usar a Eq. (5.17) como exemplo. Podemos reescrevê-la da seguinte forma:

$$a_\alpha(\omega) = a_\alpha^{(0)}(\omega) + \frac{1}{\hbar(\omega - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \int_{\Delta t}^{\infty} e^{i\omega t} [b_{\mathbf{q}}^j(t) + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(t)] a_{\alpha'}(t) dt (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'}. \quad (5.25)$$

Por outro lado, $a_\alpha(\omega) = a_\alpha^{(0)}(\omega) + a_\alpha^{(1)}(\omega) + a_\alpha^{(2)}(\omega) + \dots$, onde

$$a_\alpha^{(1)}(\omega) = \frac{1}{\hbar(\omega - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \int_{\Delta t}^{\infty} e^{i\omega t} a_{\alpha'}^{(0)}(t) [b_{\mathbf{q}}^{j(0)}(t) + b_{-\mathbf{q}}^{j(0)\dagger}(t)] dt (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} \quad (5.26)$$

$$\begin{aligned} a_\alpha^{(2)}(\omega) &= \frac{1}{\hbar(\omega - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \int_{\Delta t}^{\infty} e^{i\omega t} \{ [b_{\mathbf{q}}^{j(0)}(t) + b_{-\mathbf{q}}^{j(0)\dagger}(t)] a_{\alpha'}^{(1)}(t) \\ &\quad + [b_{\mathbf{q}}^{j(1)}(t) + b_{-\mathbf{q}}^{j(1)\dagger}(t)] a_{\alpha'}^{(0)}(t) \} dt (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} \end{aligned} \quad (5.27)$$

e por aí em diante¹.

Pela Eq. (5.26), as aproximações de primeira ordem para os operadores eletrônicos e fonônicos são obtidas desde que se conheçam os operadores de ordem zero. Então, substituindo (5.23) e (5.24) em (5.26), segue que

$$\begin{aligned} a_\alpha^{(1)}(\omega) &= \frac{1}{\hbar(\omega - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \int_{\Delta t}^{\infty} e^{i\omega t} a_{\alpha'}(0) e^{-i\omega_{\alpha'} t} [b_{\mathbf{q}}^j(0) e^{-i\omega_{\mathbf{q}}^j t} + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) e^{i\omega_{-\mathbf{q}}^j t}] dt (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} \\ &= \frac{i}{\hbar(\omega - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} a_{\alpha'}(0) \left[\frac{e^{i(\omega - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j)\Delta t}}{\omega - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j} b_{\mathbf{q}}^j(0) + \frac{e^{i(\omega - \omega_{\alpha'} + \omega_{-\mathbf{q}}^j)\Delta t}}{\omega - \omega_{\alpha'} + \omega_{-\mathbf{q}}^j} b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) \right] (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'}. \end{aligned}$$

Daqui em diante vamos simplificar os resultados considerando $\Delta t = 0$. Assim,

$$a_\alpha^{(1)}(\omega) = \frac{i}{\hbar(\omega - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \left[\frac{b_{\mathbf{q}}^j(0) a_{\alpha'}(0)}{\omega - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j} + \frac{b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) a_{\alpha'}(0)}{\omega - \omega_{\alpha'} + \omega_{-\mathbf{q}}^j} \right] (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'}. \quad (5.28)$$

Analogamente, pelas Eqs. (5.18)–(5.20), obtemos respectivamente que

$$\begin{aligned} a_\alpha^{(1)\dagger}(\omega) &= -\frac{1}{\hbar(\omega + \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \int_0^{\infty} e^{i\omega t} [b_{\mathbf{q}}^j(0) e^{-i\omega_{\mathbf{q}}^j t} + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) e^{i\omega_{-\mathbf{q}}^j t}] a_{\alpha'}^\dagger(0) e^{i\omega_{\alpha'} t} dt (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha} \\ \implies a_\alpha^{(1)\dagger}(\omega) &= \frac{1}{i\hbar(\omega + \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \left[\frac{b_{\mathbf{q}}^j(0) a_{\alpha'}^\dagger(0)}{\omega + \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j} + \frac{b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) a_{\alpha'}^\dagger(0)}{\omega + \omega_{\alpha'} + \omega_{-\mathbf{q}}^j} \right] (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha}. \end{aligned} \quad (5.29)$$

¹As expressões para os operadores criação de elétrons e operadores criação e aniquilação de fônons são obtidas pelo mesmo raciocínio.

$$\begin{aligned}
b_{\mathbf{q}}^{j(1)}(\omega) &= \frac{1}{\hbar(\omega - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2})} \sum_{\alpha\alpha'} \int_0^\infty e^{i\omega t} a_{\alpha}^\dagger(0) e^{i\omega_{\alpha} t} a_{\alpha'}(0) e^{-i\omega_{\alpha'} t} dt (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} \\
&\implies b_{\mathbf{q}}^{j(1)}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha\alpha'} \frac{a_{\alpha}^\dagger(0) a_{\alpha'}(0)}{(\omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2} - \omega)(-\omega_{\alpha} + \omega_{\alpha'} - \omega)} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'}. \tag{5.30}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{\mathbf{q}}^{j(1)\dagger}(\omega) &= -\frac{1}{\hbar(\omega + \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2})} \sum_{\alpha\alpha'} \int_0^\infty e^{i\omega t} a_{\alpha}^\dagger(0) e^{i\omega_{\alpha} t} a_{\alpha'}(0) e^{-i\omega_{\alpha'} t} dt (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} \\
&\implies b_{\mathbf{q}}^{j(1)\dagger}(\omega) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha\alpha'} \frac{a_{\alpha}^\dagger(0) a_{\alpha'}(0)}{(-\omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2} - \omega)(-\omega_{\alpha} + \omega_{\alpha'} - \omega)} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'}. \tag{5.31}
\end{aligned}$$

Aplicando a Transformada Inversa de Laplace nos operadores (5.28)–(5.31), obtemos no domínio do tempo²:

$$\begin{aligned}
a_{\alpha}^{(1)}(t) &= \frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha'\mathbf{q}j} \left[\frac{e^{-i(\omega_{\alpha} - i/\tau_1)t} - e^{-i(\omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j)t}}{\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_1}} b_{\mathbf{q}}^j(0) + \frac{e^{-i(\omega_{\alpha} - i/\tau_1)t} - e^{-i(\omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j)t}}{\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_1}} b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) \right] \\
&\quad \times a_{\alpha'}(0) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} \tag{5.32}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_{\alpha}^{(1)\dagger}(t) &= -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha'\mathbf{q}j} \left[\frac{e^{i(\omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j)t} - e^{i(\omega_{\alpha} + i/\tau_1)t}}{\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_1}} b_{\mathbf{q}}^j(0) + \frac{e^{i(\omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j)t} - e^{i(\omega_{\alpha} + i/\tau_1)t}}{\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_1}} b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) \right] \\
&\quad \times a_{\alpha'}^\dagger(0) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha} \tag{5.33}
\end{aligned}$$

$$b_{\mathbf{q}}^{j(1)}(t) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha\alpha'} \frac{e^{-i(\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha})t} - e^{-i(\omega_{\mathbf{q}}^j - i/\tau_2)t}}{-\omega_{\alpha} + \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2}} a_{\alpha}^\dagger(0) a_{\alpha'}(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'} \tag{5.34}$$

$$b_{\mathbf{q}}^{j(1)\dagger}(t) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha\alpha'} \frac{e^{i(\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'})t} - e^{i(\omega_{\mathbf{q}}^j + i/\tau_2)t}}{-\omega_{\alpha} + \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2}} a_{\alpha}^\dagger(0) a_{\alpha'}(0) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'}. \tag{5.35}$$

Vamos simplificar ainda mais nossos resultados considerando $t \gg \tau_1, \tau_2$, assim

$$a_{\alpha}^{(1)}(t) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha'\mathbf{q}j} \left[\frac{e^{-i(\omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j)t}}{\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_1}} b_{\mathbf{q}}^j(0) + \frac{e^{-i(\omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j)t}}{\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_1}} b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) \right] a_{\alpha'}(0) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha\alpha'}$$

²Utilizamos a propriedade da Transformada Inversa de Laplace $\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{(\omega_1 - \omega)(\omega_2 - \omega)} \right\} = \frac{e^{-i\omega_2 t} - e^{-i\omega_1 t}}{i(\omega_2 - \omega_1)}$

$$a_{\alpha}^{(1)\dagger}(t) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \left[\frac{e^{i(\omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j)t}}{\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_1}} b_{\mathbf{q}}^j(0) a_{\alpha'}^{\dagger}(0) + \frac{e^{i(\omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j)t}}{\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_1}} b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) a_{\alpha'}^{\dagger}(0) \right] (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha' \alpha} \quad (5.37)$$

$$b_{\mathbf{q}}^{j(1)}(t) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha'} \frac{e^{i(\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'})t}}{-\omega_{\alpha} + \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2}} a_{\alpha}^{\dagger}(0) a_{\alpha'}(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha \alpha'} \quad (5.38)$$

$$b_{\mathbf{q}}^{j(1)\dagger}(t) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha'} \frac{e^{i(\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'})t}}{\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2}} a_{\alpha}^{\dagger}(0) a_{\alpha'}(0) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha \alpha'}. \quad (5.39)$$

Agora que conhecemos as aproximações de primeira ordem, procederemos ao cálculo dos operadores eletrônicos em segunda ordem. Pela Eq. (5.27), iniciamos o cálculo para o operador aniquilação de elétrons,

$$\begin{aligned} a_{\alpha}^{(2)}(\omega) &= \frac{1}{\hbar^2 (\omega - \omega_{\alpha} + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \int_0^{\infty} e^{i\omega t} \{ -[b_{\mathbf{q}}^j(0) e^{-i\omega_{\mathbf{q}}^j t} + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) e^{i\omega_{\mathbf{q}}^j t}] \sum_{\alpha'' \mathbf{q}' j'} \left[\frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'})t}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1}} b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0) \right. \\ &+ \left. \frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'})t}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1}} b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0) \right] a_{\alpha''}(0) (d_{\mathbf{q}'}^{j'})_{\alpha' \alpha''} + \left[\sum_{\gamma \alpha''} \frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_{\gamma})t}}{-\omega_{\gamma} + \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2}} a_{\gamma}^{\dagger}(0) a_{\alpha''}(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\gamma \alpha''} \right. \\ &+ \left. \sum_{\gamma \alpha''} \frac{e^{i(\omega_{\gamma} - \omega_{\alpha''})t}}{\omega_{\gamma} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2}} a_{\gamma}^{\dagger}(0) a_{\alpha''}(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\gamma \alpha''} \right] a_{\alpha'}(0) e^{-i\omega_{\alpha'} t} \} dt (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha \alpha'} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_{\alpha}^{(2)}(\omega) &= \frac{1}{i\hbar^2 (\omega_{\alpha} - \frac{i}{\tau_1} - \omega)} \sum_{\alpha' \mathbf{q} j} \left\{ \sum_{\alpha'' \mathbf{q}' j'} \left[\frac{1}{(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}}^j + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \omega)(\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1})} b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0) + \right. \right. \\ &\frac{1}{(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \omega)(\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1})} b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0) + \frac{1}{(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \omega)(\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1})} \\ &\times b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0) + \frac{1}{(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \omega)(\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1})} b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0) \left. \right] a_{\alpha''}(0) (d_{\mathbf{q}'}^{j'})_{\alpha' \alpha''} - \\ &\sum_{\gamma \alpha''} \left[\frac{1}{(\omega_{\alpha''} - \omega_{\gamma} + \omega_{\alpha'} - \omega)(-\omega_{\gamma} + \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2})} a_{\gamma}^{\dagger}(0) a_{\alpha''}(0) + \frac{1}{(\omega_{\alpha''} - \omega_{\gamma} + \omega_{\alpha'} - \omega)(\omega_{\gamma} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2})} \right. \\ &\times \left. a_{\gamma}^{\dagger}(0) a_{\alpha''}(0) \right] a_{\alpha'}(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\gamma \alpha''} \left. \right\} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha \alpha'}. \quad (5.40) \end{aligned}$$

Procedimento similar permite obter o operador criação de elétrons no domínio da fre-

quência,

$$\begin{aligned}
a_\alpha^{(2)\dagger}(\omega) &= \frac{1}{\hbar^2(\omega + \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha' \mathbf{q} \mathbf{j}} \int_0^\infty e^{i\omega t} \{ [b_{\mathbf{q}}^j(0) e^{-i\omega_{\mathbf{q}}^j t} + b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) e^{i\omega_{\mathbf{q}}^j t}] \sum_{\alpha'' \mathbf{q}' \mathbf{j}'} \left[\frac{e^{i(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'}) t}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \frac{i}{\tau_1}} b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0) \right. \right. \\
&+ \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'}) t}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \frac{i}{\tau_1}} b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0)] a_{\alpha''}^\dagger(0) (d_{\mathbf{q}'}^{j'})_{\alpha' \alpha'} - \left[\sum_{\alpha'' \gamma} \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma) t}}{-\omega_{\alpha''} + \omega_\gamma - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2}} a_{\alpha''}^\dagger(0) a_\gamma(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'' \gamma} \right. \\
&+ \left. \left. \sum_{\alpha'' \gamma} \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma) t}}{\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2}} a_{\alpha''}^\dagger(0) a_\gamma(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'' \gamma} \right] a_{\alpha'}^\dagger(0) e^{i\omega_{\alpha'} t} \} dt (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha' \alpha}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_\alpha^{(2)\dagger}(\omega) &= \frac{1}{i\hbar^2(\omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1} + \omega)} \sum_{\alpha' \mathbf{q} \mathbf{j}} \left\{ \sum_{\alpha'' \mathbf{q}' \mathbf{j}'} \left[\frac{1}{(-\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega)(\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \frac{i}{\tau_1})} b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0) + \right. \right. \\
&\frac{1}{(-\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega)(\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \frac{i}{\tau_1})} b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0) + \frac{1}{(-\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega)(\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \frac{i}{\tau_1})} \\
&\times b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0) + \frac{1}{(-\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega)(\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \frac{i}{\tau_1})} b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0)] a_{\alpha''}^\dagger(0) (d_{\mathbf{q}'}^{j'})_{\alpha' \alpha'} - \\
&\sum_{\alpha'' \gamma} \left[\frac{1}{(-\omega_{\alpha''} + \omega_\gamma - \omega_{\alpha'} - \omega)(-\omega_{\alpha''} + \omega_\gamma - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2})} a_{\alpha''}^\dagger(0) a_\gamma(0) + \frac{1}{(-\omega_{\alpha''} + \omega_\gamma - \omega_{\alpha'} - \omega)(\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2})} \right. \\
&\times \left. a_{\alpha''}^\dagger(0) a_\gamma(0) \right] a_{\alpha'}^\dagger(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'' \gamma} \} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha' \alpha}. \tag{5.41}
\end{aligned}$$

Aplicamos a Transformada Inversa de Laplace em (5.40) e (5.41) para levarmos esses operadores para o domínio do tempo,

$$\begin{aligned}
a_\alpha^{(2)}(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha' \mathbf{q} \mathbf{j}} \left\{ \sum_{\alpha'' \mathbf{q}' \mathbf{j}'} \left[\frac{1}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1}} \frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}}^j + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'}) t} - e^{-i(\omega_\alpha - \frac{i}{\tau_1}) t}}{\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}}^j + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1}} b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0) + \right. \right. \\
&\frac{1}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1}} \frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'}) t} - e^{-i(\omega_\alpha - \frac{i}{\tau_1}) t}}{\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1}} b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0) + \frac{1}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1}} \times \\
&\frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'}) t} - e^{-i(\omega_\alpha - \frac{i}{\tau_1}) t}}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1}} b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0) + \frac{1}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1}} \frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'}) t} - e^{-i(\omega_\alpha - \frac{i}{\tau_1}) t}}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1}} \\
&\times b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0)] a_{\alpha''}^\dagger(0) (d_{\mathbf{q}'}^{j'})_{\alpha' \alpha'} - \sum_{\alpha'' \gamma} \frac{1}{\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma + \omega_{\alpha'} - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1}} \left[\frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma + \omega_{\alpha'}) t} - e^{-i(\omega_\alpha - \frac{i}{\tau_1}) t}}{-\omega_\gamma + \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2}} \right. \\
&+ \left. \frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma + \omega_{\alpha'}) t} - e^{-i(\omega_\alpha - \frac{i}{\tau_1}) t}}{\omega_\gamma - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2}} \right] a_{\alpha'}^\dagger(0) a_{\alpha''}(0) a_{\alpha'}(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'' \gamma} \} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha' \alpha} \tag{5.42}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_\alpha^{(2)\dagger}(t) = & \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha' \mathbf{q} \mathbf{j}} \left\{ \sum_{\alpha'' \mathbf{q}' \mathbf{j}'} \left[\frac{1}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} - \omega_{\mathbf{q}})t} - e^{i(\omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1})t}}{-\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} + \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1}} b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0) + \right. \right. \\
& \frac{1}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} - \omega_{\mathbf{q}})t} - e^{i(\omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1})t}}{-\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} + \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1}} b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0) + \frac{1}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} \times \\
& \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} + \omega_{\mathbf{q}})t} - e^{i(\omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1})t}}{-\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} - \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1}} b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0) + \left. \frac{1}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} + \omega_{\mathbf{q}})t} - e^{i(\omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1})t}}{-\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} - \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1}} \right. \\
& \times b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0) \left. \right] a_{\alpha''}^\dagger(0) (d_{\mathbf{q}'}^{j'})_{\alpha'' \alpha'} - \sum_{\gamma \alpha''} \frac{1}{-\omega_{\alpha''} + \omega_\gamma - \omega_{\alpha'} + \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1}} \left[\frac{e^{i(\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma + \omega_{\alpha'})t} - e^{i(\omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1})t}}{-\omega_{\alpha''} + \omega_\gamma - \omega_{\alpha'} + i/\tau_2} \right. \\
& \left. \left. + \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma + \omega_{\alpha'})t} - e^{i(\omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1})t}}{\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma - \omega_{\alpha'} - \frac{i}{\tau_2}} \right] a_{\alpha''}^\dagger(0) a_\gamma(0) a_{\alpha'}^\dagger(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'' \gamma} \right\} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha' \alpha}. \tag{5.43}
\end{aligned}$$

Considerando $t \gg \tau_1, \tau_2$ em (5.42) e (5.43), segue finalmente que

$$\begin{aligned}
a_\alpha^{(2)}(t) = & -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha' \alpha''} \sum_{\mathbf{q} \mathbf{j}} \left\{ \sum_{\mathbf{q}' \mathbf{j}'} \left[\frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}'})t}}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} \frac{b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0)}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} - \frac{i}{\tau_1}} + \frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}'})t}}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} \right. \right. \\
& \times \frac{b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0)}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} - \frac{i}{\tau_1}} + \frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}'})t}}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} \frac{b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0)}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} - \frac{i}{\tau_1}} + \frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}'})t}}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} \\
& \times \frac{b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0)}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} - \frac{i}{\tau_1}} \left. \right] a_{\alpha''}(0) (d_{\mathbf{q}'}^{j'})_{\alpha' \alpha''} - \sum_{\gamma} \frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma + \omega_{\alpha'})t}}{\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma + \omega_{\alpha'} - \omega_\alpha + \frac{i}{\tau_1}} \left(\frac{1}{-\omega_\gamma + \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}} + \frac{i}{\tau_2}} \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{\omega_\gamma - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}} - \frac{i}{\tau_2}} \right) a_\gamma^\dagger(0) a_{\alpha''}(0) a_{\alpha'}(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\gamma \alpha''} \right\} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha \alpha'} \tag{5.44}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_\alpha^{(2)\dagger}(t) = & \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha' \alpha''} \sum_{\mathbf{q} \mathbf{j}} \left\{ \sum_{\mathbf{q}' \mathbf{j}'} \left[\frac{e^{i(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} - \omega_{\mathbf{q}})t}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} + \omega_{\mathbf{q}} + \frac{i}{\tau_1}} \frac{b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0)}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} + \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} - \omega_{\mathbf{q}})t}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} + \omega_{\mathbf{q}} + \frac{i}{\tau_1}} \right. \right. \\
& \times \frac{b_{\mathbf{q}}^j(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0)}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} + \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} + \omega_{\mathbf{q}})t}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} - \omega_{\mathbf{q}} + \frac{i}{\tau_1}} \frac{b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0)}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} + \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'} + \omega_{\mathbf{q}})t}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} - \omega_{\mathbf{q}} + \frac{i}{\tau_1}} \\
& \times \frac{b_{-\mathbf{q}}^{j\dagger}(0) b_{-\mathbf{q}'}^{j'\dagger}(0)}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'} + \frac{i}{\tau_1}} \left. \right] a_{\alpha''}^\dagger(0) (d_{\mathbf{q}'}^{j'})_{\alpha'' \alpha'} - \sum_{\gamma} \frac{e^{i(\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma + \omega_{\alpha'})t}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_\gamma + \frac{i}{\tau_1}} \left(\frac{1}{-\omega_{\alpha''} + \omega_\gamma - \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_2}} \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{\omega_{\alpha''} - \omega_\gamma - \omega_{\alpha'} - \frac{i}{\tau_2}} \right) a_{\alpha''}^\dagger(0) a_\gamma(0) a_{\alpha'}^\dagger(0) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'' \gamma} \right\} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha' \alpha}. \tag{5.45}
\end{aligned}$$

5.3 Densidade de corrente dissipativa

Para o cálculo da densidade de corrente dissipativa, usaremos a seguinte expressão, válida para um sistema fora do equilíbrio [21],

$$j_y = -\frac{e}{L_x L_y} \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha | v_y | \alpha' \rangle \langle \langle a_\alpha^\dagger(t) a_{\alpha'}(t) \rangle \rangle. \quad (5.46)$$

Assumindo que $a_\alpha(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_\alpha^{(n)}(t)$, onde $a_\alpha^{(n)}(t)$ foram calculados na seção anterior para $n = \{0, 1, 2\}$, podemos escrever a média dos operadores eletrônicos dependentes do tempo da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \langle \langle a_\alpha^\dagger(t) a_{\alpha'}(t) \rangle \rangle &= \langle \langle [a_\alpha^{(0)\dagger}(t) + a_\alpha^{(1)\dagger}(t) + a_\alpha^{(2)\dagger}(t) + \dots] [a_{\alpha'}^{(0)}(t) + a_{\alpha'}^{(1)}(t) + a_{\alpha'}^{(2)}(t) + \dots] \rangle \rangle \\ &= \langle \langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(0)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(1)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(2)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(1)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(0)}(t) \rangle \rangle + \\ &\langle \langle a_\alpha^{(1)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(1)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(1)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(2)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(2)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(0)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(2)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(1)}(t) \rangle \rangle \dots \end{aligned} \quad (5.47)$$

Consideremos apenas as contribuições até segunda ordem com relação às constantes de interação elétron-fônon $C_{\mathbf{q}}^T$ e $C_{\mathbf{q}}^L$. Deste modo, a média (5.47) se reduz a

$$\begin{aligned} \langle \langle a_\alpha^\dagger(t) a_{\alpha'}(t) \rangle \rangle &= \langle \langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(0)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(1)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(2)}(t) \rangle \rangle \\ &+ \langle \langle a_\alpha^{(1)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(0)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(1)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(1)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(2)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(0)}(t) \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (5.48)$$

Usaremos o Teorema de Bloch-De Dominicis³ [50], [51] para calcular cada uma das

³O Teorema de Bloch-De Dominicis afirma que o valor esperado do produto de operadores fermiônicos $\langle \langle A_n A_{n-1} \dots A_1 \rangle \rangle$ é igual a zero se n é ímpar, ou igual a $\sum_{m=1}^{n-1} (-1)^{n-m-1} \langle \langle A_n A_m \rangle \rangle \langle \langle A_{n-1} \dots A_{m+1} A_{m-1} \dots A_1 \rangle \rangle$ se n é par. Por exemplo para $n = 4$, temos $\langle \langle A_4 A_3 A_2 A_1 \rangle \rangle = \langle \langle A_4 A_3 \rangle \rangle \langle \langle A_2 A_1 \rangle \rangle - \langle \langle A_4 A_2 \rangle \rangle \langle \langle A_3 A_1 \rangle \rangle + \langle \langle A_4 A_1 \rangle \rangle \langle \langle A_3 A_2 \rangle \rangle$. Aqui $\langle \langle A_n A_m \rangle \rangle = \frac{\{A_n, A_m\}}{e^{\ell(\epsilon_n - \mu)/k_B T_e} + 1}$, onde $\{A_n, A_m\} = A_n A_m + A_m A_n$ (relação de anticomutação); $\ell = 1$ se A_n é um operador criação ou $\ell = -1$ se A_n é um operador aniquilação. Vale ressaltar que este teorema somente é válido para sistemas em equilíbrio termodinâmico, em nosso caso esta condição é satisfeita para $t = 0$.

médias em (5.48). Iniciamos pela média dos operadores de ordem zero:

$$\langle\langle a_{\alpha}^{(0)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(0)}(t)\rangle\rangle = \langle\langle a_{\alpha}^{\dagger}(0)e^{i\omega_{\alpha}t}a_{\alpha'}(0)e^{-i\omega_{\alpha'}t}\rangle\rangle = \langle\langle a_{\alpha}^{\dagger}(0)a_{\alpha'}(0)\rangle\rangle e^{i(\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha'})t} = \delta_{\alpha\alpha'}f_{\alpha}. \quad (5.49)$$

Mais facilmente concluímos que

$$\langle\langle a_{\alpha}^{(0)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(1)}(t)\rangle\rangle = \langle\langle a_{\alpha}^{(1)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(0)}(t)\rangle\rangle = 0, \quad (5.50)$$

pois temos médias sobre um número ímpar de operadores.

Com um pouco mais de trabalho obtemos as expressões para as demais médias. Para $\langle\langle a_{\alpha}^{(1)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(1)}(t)\rangle\rangle$ temos:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{\alpha}^{(1)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(1)}(t)\rangle\rangle &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{j}\mathbf{q}'\mathbf{j}'} \sum_{\alpha''\alpha'''} \left[\frac{\langle\langle b_{\mathbf{q}}^j(0)b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0)\rangle\rangle e^{i(\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}}^j-\omega_{\alpha'''}-\omega_{\mathbf{q}'}^{j'})t}}{(\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'}-\omega_{\alpha'''}-\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}-\frac{i}{\tau_1})} \right. \\ &+ \frac{\langle\langle b_{\mathbf{q}}^j(0)b_{-\mathbf{q}'}^{j'}(0)\rangle\rangle e^{i(\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}}^j-\omega_{\alpha'''}+\omega_{\mathbf{q}'}^{j'})t}}{(\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'}-\omega_{\alpha'''}+\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}-\frac{i}{\tau_1})} + \frac{\langle\langle b_{-\mathbf{q}}^{j'}(0)b_{\mathbf{q}'}^j(0)\rangle\rangle e^{i(\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}}^j-\omega_{\alpha'''}-\omega_{\mathbf{q}'}^{j'})t}}{(\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'}-\omega_{\alpha'''}-\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}-\frac{i}{\tau_1})} \\ &+ \left. \frac{\langle\langle b_{-\mathbf{q}}^{j'}(0)b_{-\mathbf{q}'}^j(0)\rangle\rangle e^{i(\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}}^j-\omega_{\alpha'''}+\omega_{\mathbf{q}'}^{j'})t}}{(\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'}-\omega_{\alpha'''}+\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}-\frac{i}{\tau_1})} \right] \langle\langle a_{\alpha''}^{\dagger}(0)a_{\alpha'''}(0)\rangle\rangle (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha} (d_{\mathbf{q}'}^{j'})_{\alpha'\alpha'''} \\ \langle\langle a_{\alpha}^{(1)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(1)}(t)\rangle\rangle &= -\frac{1}{\hbar^2(\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha'}+2i/\tau_1)} \sum_{\alpha''\mathbf{q}\mathbf{j}} \left[\frac{(1+n_{\mathbf{q}}^j)f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}}^j+i/\tau_1} - \frac{(1+n_{\mathbf{q}}^j)f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha'}-\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}}^j-i/\tau_1} \right. \\ &+ \left. \frac{n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}}^j+i/\tau_1} - \frac{n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha'}-\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}}^j-i/\tau_1} \right] (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha''} \quad (5.51) \end{aligned}$$

Agora a média $\langle\langle a_{\alpha}^{(2)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(0)}(t)\rangle\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{\alpha}^{(2)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(0)}(t)\rangle\rangle &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha''\alpha'''} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{j}} \left\{ \sum_{\mathbf{q}'\mathbf{j}'} \left[\frac{\langle\langle b_{\mathbf{q}}^j(0)b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0)\rangle\rangle \langle\langle a_{\alpha''}^{\dagger}(0)a_{\alpha'}(0)\rangle\rangle e^{-i(\omega_{\alpha'}-\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}+\omega_{\mathbf{q}}^j)t}}{(\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}}^j+\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}+\frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'''}-\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}+\frac{i}{\tau_1})} \right. \right. \\ &+ \frac{\langle\langle b_{\mathbf{q}}^j(0)b_{-\mathbf{q}'}^{j'}(0)\rangle\rangle \langle\langle a_{\alpha''}^{\dagger}(0)a_{\alpha'}(0)\rangle\rangle e^{-i(\omega_{\alpha'}-\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}+\omega_{\mathbf{q}}^j)t}}{(\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}}^j+\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}+\frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'''}-\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}+\frac{i}{\tau_1})} + \frac{\langle\langle b_{-\mathbf{q}}^{j'}(0)b_{\mathbf{q}'}^j(0)\rangle\rangle \langle\langle a_{\alpha''}^{\dagger}(0)a_{\alpha'}(0)\rangle\rangle e^{-i(\omega_{\alpha'}-\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}-\omega_{\mathbf{q}}^j)t}}{(\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}}^j-\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}+\frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'''}-\omega_{\alpha''}+\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}+\frac{i}{\tau_1})} \\ &+ \left. \frac{\langle\langle b_{-\mathbf{q}}^{j'}(0)b_{-\mathbf{q}'}^j(0)\rangle\rangle \langle\langle a_{\alpha''}^{\dagger}(0)a_{\alpha'}(0)\rangle\rangle e^{-i(\omega_{\alpha'}-\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}-\omega_{\mathbf{q}}^j)t}}{(\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}}^j-\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}+\frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'''}-\omega_{\alpha''}-\omega_{\mathbf{q}'}^{j'}+\frac{i}{\tau_1})} \right] (d_{\mathbf{q}'}^{j'})_{\alpha''\alpha'''} - \sum_{\gamma} [(-\omega_{\alpha''}+\omega_{\gamma}-\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_2})^{-1} + \\ &(\omega_{\alpha''}-\omega_{\gamma}-\omega_{\mathbf{q}}^j-\frac{i}{\tau_2})^{-1}] \frac{e^{-i(\omega_{\alpha'}-\omega_{\alpha''}+\omega_{\gamma}-\omega_{\alpha'''})t}}{\omega_{\alpha}-\omega_{\alpha''}-\omega_{\alpha'''}+\omega_{\gamma}+\frac{i}{\tau_1}} \langle\langle a_{\alpha''}^{\dagger}(0)a_{\gamma}(0)a_{\alpha'''}^{\dagger}(0)a_{\alpha'}(0)\rangle\rangle (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\gamma} \} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'''\alpha} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle\langle a_\alpha^{(2)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(0)}(t)\rangle\rangle &= \frac{f_{\alpha'}}{\hbar^2(\omega_\alpha - \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\mathbf{qj}} \left[\left(\frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}^j + i/\tau_2} + \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}^j - i/\tau_2} \right) \sum_{\alpha''} f_{\alpha''} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha'} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha} \right. \\
&+ \sum_{\alpha'''} \left(\frac{1+n_{\mathbf{q}}^j}{\omega_{\alpha'''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_1}} + \frac{n_{\mathbf{q}}^j}{\omega_{\alpha'''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_1}} + \frac{1-f_{\alpha'''}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha'''} + \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2}} - \frac{1-f_{\alpha'''}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha'''} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2}} \right) \\
&\times (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha'''} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'''\alpha} \left. \right].
\end{aligned}$$

Substituindo α''' por α'' no terceiro somatório, resulta que

$$\begin{aligned}
\langle\langle a_\alpha^{(2)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(0)}(t)\rangle\rangle &= \frac{f_{\alpha'}}{\hbar^2(\omega_\alpha - \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha''\mathbf{qj}} \left[\left(\frac{1+n_{\mathbf{q}}^j}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j + i/\tau_1} + \frac{n_{\mathbf{q}}^j}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j + i/\tau_1} \right) \right. \\
&\times (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha''} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha} + \left(\frac{f_{\alpha''}}{\omega_{\mathbf{q}}^j + i/\tau_2} + \frac{f_{\alpha''}}{\omega_{\mathbf{q}}^j - i/\tau_2} \right) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha''} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha} \\
&- \left. \left(\frac{1-f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j - i/\tau_2} - \frac{1-f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha'} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}}^j - i/\tau_2} \right) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha''} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha} \right]. \quad (5.52)
\end{aligned}$$

Por fim calculamos $\langle\langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(2)}(t)\rangle\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle\langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(2)}(t)\rangle\rangle &= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha''\alpha'''} \sum_{\mathbf{qj}} \left\{ \sum_{\mathbf{q}'j'} \left[\frac{\langle\langle b_{\mathbf{q}}^j(0)b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0)\rangle\rangle \langle\langle a_\alpha^\dagger(0)a_{\alpha''}(0)\rangle\rangle e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'})t}}{(\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'''} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1})} + \right. \\
&\frac{\langle\langle b_{\mathbf{q}}^j(0)b_{-\mathbf{q}'}^{j'}(0)\rangle\rangle \langle\langle a_\alpha^\dagger(0)a_{\alpha''}(0)\rangle\rangle e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'})t}}{(\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'''} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1})} + \frac{\langle\langle b_{-\mathbf{q}}^j(0)b_{\mathbf{q}'}^{j'}(0)\rangle\rangle \langle\langle a_\alpha^\dagger(0)a_{\alpha''}(0)\rangle\rangle e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'})t}}{(\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'''} - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1})} \\
&+ \left. \frac{\langle\langle b_{-\mathbf{q}}^j(0)b_{-\mathbf{q}'}^{j'}(0)\rangle\rangle \langle\langle a_\alpha^\dagger(0)a_{\alpha''}(0)\rangle\rangle e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'})t}}{(\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} + \frac{i}{\tau_1})(\omega_{\alpha'''} - \omega_{\alpha''} + \omega_{\mathbf{q}'}^{j'} - \frac{i}{\tau_1})} \right] (d_{\mathbf{q}'}^{j'})_{\alpha'''\alpha''} - \sum_{\gamma} [(-\omega_\gamma + \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2})^{-1} + \\
&(\omega_\gamma - \omega_{\alpha''} - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2})^{-1}] \frac{e^{-i(\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha - \omega_\gamma + \omega_{\alpha'''})t}}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\alpha'''} - \omega_\gamma + \frac{i}{\tau_1}} \langle\langle a_\alpha^\dagger(0)a_\gamma^\dagger(0)a_{\alpha''}(0)a_{\alpha'''}(0)\rangle\rangle (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\gamma\alpha''} \left. \right\} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha'''}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle\langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(2)}(t)\rangle\rangle &= -\frac{f_\alpha}{\hbar^2(\omega_\alpha - \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\mathbf{qj}} \left[\left(\frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}^j + i/\tau_2} + \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}^j - i/\tau_2} \right) \sum_{\alpha''} f_{\alpha''} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha'} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha} \right. \\
&+ \sum_{\alpha'''} \left(\frac{1+n_{\mathbf{q}}^j}{\omega_{\alpha'''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_1}} + \frac{n_{\mathbf{q}}^j}{\omega_{\alpha'''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_1}} - \frac{f_{\alpha'''}}{\omega_{\alpha'''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2}} + \frac{f_{\alpha'''}}{\omega_{\alpha'''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2}} \right) \\
&\times (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha'''} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'''\alpha} \left. \right].
\end{aligned}$$

Trocando α''' por α'' no terceiro somatório, resulta finalmente que

$$\begin{aligned}
\langle\langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(2)}(t)\rangle\rangle &= -\frac{f_\alpha}{\hbar^2(\omega_\alpha - \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1})} \sum_{\alpha''\mathbf{qj}} \left[\left(\frac{1+n_{\mathbf{q}}^j}{\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j - i/\tau_1} + \frac{n_{\mathbf{q}}^j}{\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j - i/\tau_1} \right) \right. \\
&\times (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha''} + \left(\frac{f_{\alpha''}}{\omega_{\mathbf{q}}^j + i/\tau_2} + \frac{f_{\alpha''}}{\omega_{\mathbf{q}}^j - i/\tau_2} \right) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha''} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha} \\
&+ \left. \left(\frac{f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j - i/\tau_2} - \frac{f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j - i/\tau_2} \right) (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha} (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha''} \right]. \quad (5.53)
\end{aligned}$$

Então, uma aproximação para a densidade de corrente dissipativa, até segunda ordem da constante de interação elétron-fônon, é dada pela expressão abaixo:

$$j_y^{(2)} = -\frac{e}{L_x L_y} \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha | v_y | \alpha' \rangle [\langle \langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(2)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(1)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(1)}(t) \rangle \rangle + \langle \langle a_\alpha^{(2)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(0)}(t) \rangle \rangle]. \quad (5.54)$$

Repare que a média $\langle \langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(0)}(t) \rangle \rangle$, embora diferente de zero, não participa dos processos dissipativos, uma vez que os termos de ordem zero não incluem qualquer interação elétron-fônon⁴.

Substituindo (5.51), (5.52) e (5.53) em (5.54), obtemos

$$\begin{aligned} j_y^{(2)} = & \frac{1}{\hbar^2} \frac{e}{L_x L_y} \sum_{\mathbf{q}^j} \sum_{\alpha\alpha'\alpha''} \langle \alpha | v_y | \alpha' \rangle \left\{ \frac{1}{\omega_\alpha - \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1}} \left[\frac{f_\alpha(1+n_{\mathbf{q}}^j)}{\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_1}} + \frac{n_{\mathbf{q}}^j f_\alpha}{\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_1}} - \frac{f_\alpha f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2}} \right] \right. \\ & + \frac{f_\alpha f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2}} \left. \right] (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha''} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha} + \frac{1}{\omega_\alpha - \omega_{\alpha'} + \frac{2i}{\tau_1}} \left[\frac{f_{\alpha''}(1+n_{\mathbf{q}}^j)}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_1}} - \frac{f_{\alpha''}(1+n_{\mathbf{q}}^j)}{\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_1}} \right. \\ & - \frac{n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_1}} + \frac{n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_1}} \left. \right] (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha''} - \frac{1}{\omega_\alpha - \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1}} \left[\frac{f_{\alpha'}(1+n_{\mathbf{q}}^j)}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_1}} \right. \\ & + \frac{n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha'}}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_1}} - \frac{f_{\alpha'}(1-f_{\alpha''})}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2}} + \frac{f_{\alpha'}(1-f_{\alpha''})}{\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2}} \left. \right] (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha''} - \frac{f_{\alpha''}(f_{\alpha'} - f_\alpha)}{\omega_\alpha - \omega_{\alpha'} + \frac{i}{\tau_1}} \\ & \times \left(\frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}^j - \frac{i}{\tau_2}} + \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}^j + \frac{i}{\tau_2}} \right) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha''} \left. \right\}. \quad (5.55) \end{aligned}$$

Aqui, $f_\alpha = \{\exp[(\tilde{\epsilon}_\alpha - \mu)/k_B T_e] + 1\}^{-1}$ e $n_{\mathbf{q}}^j = [\exp(\hbar\omega_{\mathbf{q}})/k_B T - 1]^{-1}$ são as funções de distribuição de Fermi-Dirac e de Planck, as quais apresentam as populações iniciais de elétrons e fônons, respectivamente. T_e representa a temperatura dos elétrons, T a temperatura da rede cristalina e $\tilde{\epsilon}_\alpha = \kappa\sqrt{2n}\frac{\hbar v_F}{l_B}(1 - \eta^2)^{1/4}$ são os níveis de Landau em um sistema de referência de Lorentz que se move com velocidade de deriva $v_D = \eta v_F$ (na Seção 5.5 fazemos uma discussão sobre essa mudança de referencial para a estimativa de f_α).

Como $\langle \alpha | v_y | \alpha' \rangle = i(\omega_\alpha - \omega_{\alpha'}) \langle \alpha | y | \alpha' \rangle$ e $\lim_{\tau_{1,2} \rightarrow \infty} \frac{\omega_\alpha - \omega_{\alpha'}}{\omega_\alpha - \omega_{\alpha'} + i/\tau_{1,2}} = 1 - \delta_{\alpha,\alpha'}$, podemos

⁴Esta média será útil apenas no cálculo da condutividade Hall, na seção seguinte.

reescrever a densidade de corrente dissipativa da seguinte forma

$$\begin{aligned}
j_y^{(2)} &= \frac{i}{\hbar^2} \frac{e}{L_x L_y} \sum_{\mathbf{q}^j} \sum_{\alpha\alpha'\alpha''} (1 - \delta_{\alpha,\alpha'}) \langle \alpha | y | \alpha' \rangle \left\{ \left[\frac{f_\alpha(1+n_{\mathbf{q}}^j)}{\omega_{\alpha''}-\omega_\alpha+\omega_{\mathbf{q}}^j-\frac{i}{\tau_1}} + \frac{n_{\mathbf{q}}^j f_\alpha}{\omega_{\alpha''}-\omega_\alpha-\omega_{\mathbf{q}}^j-\frac{i}{\tau_1}} - \frac{f_\alpha f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha''}-\omega_\alpha+\omega_{\mathbf{q}}^j-\frac{i}{\tau_2}} \right. \right. \\
&+ \left. \frac{f_\alpha f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha''}-\omega_\alpha-\omega_{\mathbf{q}}^j-\frac{i}{\tau_2}} \right] (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha''} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha} + \left[\frac{f_{\alpha''}(1+n_{\mathbf{q}}^j)}{\omega_{\alpha''}-\omega_{\alpha'}-\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_1}} - \frac{f_{\alpha''}(1+n_{\mathbf{q}}^j)}{\omega_{\alpha''}-\omega_\alpha-\omega_{\mathbf{q}}^j-\frac{i}{\tau_1}} - \frac{n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha''}-\omega_\alpha+\omega_{\mathbf{q}}^j-\frac{i}{\tau_1}} \right. \\
&+ \left. \frac{n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha''}}{\omega_{\alpha''}-\omega_{\alpha'}+\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_1}} - \frac{f_{\alpha'}(1+n_{\mathbf{q}}^j)}{\omega_{\alpha''}-\omega_{\alpha'}-\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_1}} - \frac{n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha'}}{\omega_{\alpha''}-\omega_{\alpha'}+\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_1}} + \frac{f_{\alpha'}(1-f_{\alpha''})}{\omega_{\alpha''}-\omega_{\alpha'}-\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_2}} - \frac{f_{\alpha'}(1-f_{\alpha''})}{\omega_{\alpha''}-\omega_{\alpha'}+\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_2}} \right] \\
&\times (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha''} - f_{\alpha''} (f_{\alpha'} - f_\alpha) \left(\frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}^j-\frac{i}{\tau_2}} + \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}^j+\frac{i}{\tau_2}} \right) (d_{\mathbf{q}}^j)_{\alpha'\alpha} (d_{-\mathbf{q}}^j)_{\alpha''\alpha''} \}. \quad (5.56)
\end{aligned}$$

Em (5.56) aplicaremos a fórmula de Plemelj⁵ [52] nos termos do tipo $\frac{1}{\omega_\nu - \omega_\mu \pm \omega_{\mathbf{q}}^j \pm i/\tau_{1,2}}$, com $\tau_{1,2} \rightarrow \infty$. A parte relacionada com os valores principais (transições virtuais) não contribui para $j_y^{(2)}$, pois o seu somatório é nulo. Daí que $j_y^{(2)}$ possui apenas transições reais, isto é, caracterizadas pelas delta-funções:

$$j_y^{(2)} = -\frac{\pi}{\hbar^2} \frac{e}{L_x L_y} \sum_{\mathbf{q}^j} \sum_{\alpha\alpha'\alpha''} (1 - \delta_{\alpha,\alpha'}) \langle \alpha | y | \alpha' \rangle \Delta(\alpha, \alpha', \alpha'', \mathbf{q}, j), \quad (5.57)$$

onde $\Delta(\alpha, \alpha', \alpha'', \mathbf{q}, j) = [\delta(\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j) f_\alpha (1 + n_{\mathbf{q}}^j) + \delta(\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j) n_{\mathbf{q}}^j f_\alpha - \delta(\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j) f_\alpha f_{\alpha''} + \delta(\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j) f_\alpha f_{\alpha''}] \langle \alpha' | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_{\mathbf{q}}^j | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_{-\mathbf{q}}^j | \alpha \rangle + [-\delta(\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j) f_{\alpha''} (1 + n_{\mathbf{q}}^j) - \delta(\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j) f_{\alpha''} (1 + n_{\mathbf{q}}^j) - \delta(\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j) n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha''} - \delta(\omega_{\alpha''} - \omega_\alpha + \omega_{\mathbf{q}}^j) n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha''} + \delta(\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j) f_{\alpha'} (1 + n_{\mathbf{q}}^j) + \delta(\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j) n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha'} - \delta(\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j) f_{\alpha'} (1 - f_{\alpha''}) + \delta(\omega_{\alpha''} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j) f_{\alpha'} (1 - f_{\alpha''})] \langle \alpha'' | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_{\mathbf{q}}^j | \alpha \rangle \langle \alpha' | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_{-\mathbf{q}}^j | \alpha'' \rangle$.

Usando a relação de completeza $\sum_\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = 1$ e permutando apropriadamente α com α' e \mathbf{q} com $-\mathbf{q}$, prova-se que $\sum_{\mathbf{q}^j} \sum_{\alpha\alpha'\alpha''} \langle \alpha | y | \alpha' \rangle \Delta(\alpha, \alpha', \alpha'', \mathbf{q}, j) = 0$. Em seguida, após algumas manipulações algébricas, obtemos que

$$j_y^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{e}{L_x L_y} \sum_{\mathbf{q}^j} \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha | y | \alpha' \rangle \langle \alpha | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_{\mathbf{q}}^j | \alpha' \rangle \langle \alpha' | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_{-\mathbf{q}}^j | \alpha \rangle [\delta(\omega_\alpha - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j) (f_\alpha + n_{\mathbf{q}}^j f_\alpha - f_\alpha f_{\alpha'} - n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha'}) + \delta(\omega_{\alpha'} - \omega_\alpha - \omega_{\mathbf{q}}^j) (n_{\mathbf{q}}^j f_\alpha + f_\alpha f_{\alpha'} - f_{\alpha'} - n_{\mathbf{q}}^j f_{\alpha'})].$$

Por fim, permutando α com α' e \mathbf{q} com $-\mathbf{q}$ no segundo termo, segue a expressão

⁵A fórmula de Plemelj (ou fórmula de Dirac) estabelece que $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\omega \pm i/\tau} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega} \mp i\pi\delta(\omega)$, onde \mathcal{P} é o valor principal de Cauchy.

simplificada para a densidade de corrente dissipativa até segunda ordem com respeito à constante de interação elétron-fônon:

$$\begin{aligned} j_y^{(2)} &= \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{e}{L_x L_y} \sum_{\mathbf{q}^j} \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_{\mathbf{q}}^j | \alpha' \rangle \langle \alpha' | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C_{-\mathbf{q}}^j | \alpha \rangle \delta(\omega_\alpha - \omega_{\alpha'} - \omega_{\mathbf{q}}^j) \\ &\quad \times [f_\alpha(1 - f_{\alpha'}) + n_{\mathbf{q}}^j(f_\alpha - f_{\alpha'})][\langle \alpha | y | \alpha \rangle - \langle \alpha' | y | \alpha' \rangle]. \end{aligned} \quad (5.58)$$

Aqui $\langle \alpha | y | \alpha \rangle = y_0^{n,\kappa}(k_x) - \eta l_B \kappa \sqrt{n/2} (1 - \eta^2)^{-1/4}$, conforme está demonstrado no Apêndice B.

5.4 Condutividade Hall

A densidade de corrente perpendicular ao campo elétrico, isto é, na direção x , pode ser escrita de acordo com a fórmula abaixo,

$$j_x = -\frac{e}{L_x L_y} \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha | v_x | \alpha' \rangle \langle \langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t) a_{\alpha'}^{(0)}(t) \rangle \rangle. \quad (5.59)$$

Repare que consideramos apenas o termo de ordem zero com respeito à constante de interação elétron-fônon, uma vez que nesta direção o transporte é não dissipativo. O elemento de matriz da velocidade v_x é dado por, $\langle \alpha | v_x | \alpha' \rangle = v_F \int d\mathbf{r} \psi_{n,k_x}^\kappa(\mathbf{r}) \sigma_x \psi_{n',k'_x}^{\kappa'}(\mathbf{r})$.

Após algumas manipulações algébricas, $\langle \alpha | v_x | \alpha' \rangle$ pode ser reduzido a

$$\begin{aligned} \langle \alpha | v_x | \alpha' \rangle &= \frac{\eta v_F}{L_x L_y} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx e^{-i(k_x - k'_x)x} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy [\Phi_n(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)) \Phi_{n'}(\tilde{y}_{n',k'_x}^{\kappa'}(y)) + \\ &\quad \kappa \kappa' \Phi_{n-1}(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)) \Phi_{n'-1}(\tilde{y}_{n',k'_x}^{\kappa'}(y)) - \frac{\kappa'}{\eta} \Phi_n(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)) \Phi_{n'-1}(\tilde{y}_{n',k'_x}^{\kappa'}(y)) \\ &\quad - \frac{\kappa}{\eta} \Phi_{n-1}(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)) \Phi_{n'}(\tilde{y}_{n',k'_x}^{\kappa'}(y))]. \end{aligned} \quad (5.60)$$

Considerando condições periódicas de contorno na direção do eixo x , resulta que $\frac{2}{L_x} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx e^{-i(k_x - k'_x)x} = \delta_{k_x, k'_x}$. Além disso, as funções oscilatórias $\Phi_n(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y))$ e $\Phi_{n'}(\tilde{y}_{n',k'_x}^{\kappa'}(y))$ são ortonormais, se e somente se, seus argumentos são iguais, isto é $\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y) = \tilde{y}_{n',k'_x}^{\kappa'}(y)$

(vide Apêndice A). Felizmente $\langle\langle a_\alpha^{(0)\dagger}(t)a_{\alpha'}^{(0)}(t)\rangle\rangle = \delta_{\alpha,\alpha'}f_\alpha$ (veja a seção anterior), o que nos permite aplicar a ortogonalidade das funções Φ_n em (5.60), desde que consideremos $L_y \rightarrow \infty$. A densidade de corrente não dissipativa (5.59) passa a ser expressa conforme o resultado abaixo,

$$j_x = -\frac{e\eta v_F}{2L_x L_y} \sum_\alpha \delta_{k_x, k_x} \left(\delta_{n,n} + \delta_{n-1,n-1} - \frac{1}{\eta} \delta_{n,n-1} - \frac{1}{\eta} \delta_{n-1,n} \right) f_\alpha \quad (5.61)$$

$$j_x = -\frac{e\eta v_F}{L_x L_y} \sum_{n, k_x} f_{n,+} \quad (5.62)$$

Seja a condição $0 < y_0(k_x) < L_y$, onde $y_0(k_x) = l_B^2 k_x$ é o centro da órbita ciclotrônica. Como $k_x = \frac{2\pi}{L_x} N_{k_x}$, segue que o somatório em k_x na Eq. (5.62) tem como resultado $N_{k_x} = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2}$. Então,

$$j_x = -\frac{e^2 E}{h} \sum_n f_{n,+} \quad (5.63)$$

Nas Eqs. (5.61)–(5.63) estamos assumindo que a energia de Fermi está entre dois níveis de Landau da banda de condução, conforme a Fig. 5.1.

Para $n = 0$ observamos dois modos de energia zero, um do tipo elétron e outro do tipo buraco, uma vez que próximo da borda da amostra sua energia é curvada para cima (elétron) e para baixo (buraco) [9]. Os outros níveis de Landau são duplamente degenerados. Devemos, então, contar quantos níveis de energia estão abaixo da energia de Fermi (de natureza eletrônica, pois a banda de valência está totalmente preenchida e portanto não contribui para o transporte de corrente). Esta contagem é igual a $2N + 1$, com $N = 0, 1, 2, \dots$ (para o caso da Fig. 5.1 tem-se $N = 2$). Por fim, levando em conta a degenerescência relacionada ao grau de liberdade de spin, multiplicamos a Eq. (5.63) por dois,

$$j_x = -\frac{4e^2 E}{h} \left(N + \frac{1}{2} \right). \quad (5.64)$$

Por fim obtemos a condutividade Hall,

$$\sigma_H = \frac{4e^2}{h} \left(N + \frac{1}{2} \right). \quad (5.65)$$

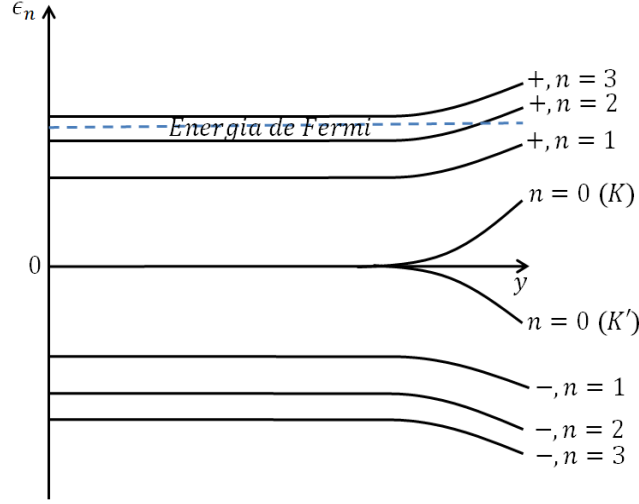


Figura 5.1: Oito primeiros níveis de Landau no grafeno. Enquanto os NLs na banda de condução ficam curvados para cima quando se aproximam da borda da amostra, os NLs na banda de valência são curvados para baixo. O NL $n = 0$ aumenta no ponto de Dirac K e diminui no ponto de Dirac K' .

Ressaltamos que o resultado (5.65) coincide com a expressão originalmente obtida por Gusynin e Sharapov [14].

5.5 Considerações adicionais

A Eq. (5.58), obtida na Seção 5.3, estabelece que somente transições reais de energias, devido ao espalhamento por fonons acústicos no plano, estão contribuindo para a densidade de corrente dissipativa. Basicamente, um elétron com energia $\epsilon_{\alpha'}$ caracterizado pelo estado $|\alpha'\rangle$ sofre um espalhamento para um estado $|\alpha\rangle$ de energia ϵ_{α} emitindo conseqüentemente um fônons de estado $|\mathbf{q}\rangle$ e energia $\omega_{\mathbf{q}}^j$ (Fig. 5.2).

Repare que a densidade de corrente (5.58) não inclui transições do tipo $\delta(\omega_{\alpha} - \omega_{\alpha'} + \omega_{\mathbf{q}}^j)$, as quais representam o espalhamento de elétrons por fônons com a absorção de energia. Esta ausência é apenas aparente, uma vez a transição de energia com absorção pode ser transformada em uma transição de energia com emissão desde que, em um dado

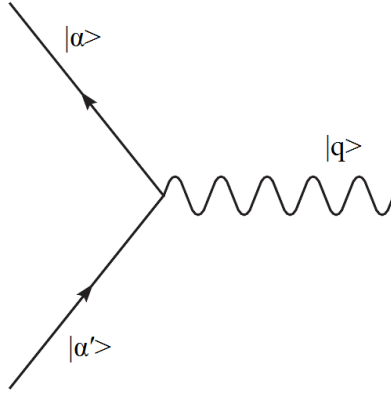


Figura 5.2: Acoplamento de elétrons a fônons acústicos no plano. As linhas retas representam os elétrons, a linha ondulada representa fônons no plano.

somatório, os estados $|\alpha\rangle$ e $|\alpha'\rangle$ sejam permutados e a condição de paridade da função delta de Dirac seja aplicada. Sendo assim, o termo $f_\alpha(1 - f_\beta)$ deve ser associado às transições envolvendo emissão, enquanto o termo $n_{\mathbf{q}}(f_\alpha - f_\beta)$ deve está relacionado às transições envolvendo absorção⁶.

Outro ponto que merece ser discutido refere-se à função de distribuição de elétrons f_α , presente na densidade de corrente dissipativa (5.58). Na Seção 5.3 introduzimos esta função como sendo $f_\alpha = \{\exp[(\tilde{\epsilon}_\alpha - \mu)/k_B T_e] + 1\}^{-1}$, onde $\tilde{\epsilon}_\alpha = \kappa\sqrt{2n}\frac{\hbar v_F}{l_B}(1 - \eta^2)^{1/4}$. Um leitor mais atento deve ter reparado que esta energia difere daquela obtida na Seção 4.4, a saber ϵ_α dada pela Eq. (4.47). De fato, as energias são diferentes porque foram calculadas em diferentes sistemas de referências. Enquanto ϵ_α representa as autoenergias dos níveis de Landau para um observador no sistema de referência do laboratório, $\tilde{\epsilon}_\alpha$ representa esses mesmos níveis, porém para um sistema de referência de Lorentz que se move junto com o elétron, com uma velocidade de deriva $v_D = \eta v_F$. Esta mudança de sistema de referência foi necessária pelo simples motivo de desconhecermos a função de distribuição de Fermi-Dirac para o sistema de referência do laboratório, onde o campo

⁶Suponha, por exemplo, que a temperatura da rede T seja igual a zero. Então $n_{\mathbf{q}} = 0$ e portanto nenhuma transição de energia com absorção de fônons ocorre. Neste caso, as transições de energia devem necessariamente ocorrer com emissão de fônons.

elétrico é diferente de zero e o transporte dos portadores de carga é não-linear. Não obstante, no sistema de referência transladante que se move com velocidade v_D , o campo elétrico é nulo, e portanto a função de distribuição de Fermi-Dirac pode ser aplicada em sua forma usual⁷. Note ainda que a energia $\tilde{\epsilon}_\alpha$ corresponde à solução (4.23) onde o campo elétrico é nulo, porém com $\tilde{B} = \sqrt{1 - \eta^2}B$, o campo magnético no sistema de referência transladante [38].

Com o parágrafo anterior em mente, podemos mostrar que a densidade de corrente dissipativa (5.58) é nula quando o campo elétrico é nulo⁸. De fato, usando a condição imposta pela transição de energia $\omega_{\mathbf{q}}^j = \omega_\alpha - \omega_{\alpha'}$, reescrevemos a distribuição de fônons $n_{\mathbf{q}}^j$ em termos das distribuições de elétrons,

$$n_{\mathbf{q}}^j = \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\mathbf{q}}^j/k_B T} - 1} = \frac{1}{e^{(\tilde{\epsilon}_\alpha - \tilde{\epsilon}_{\alpha'})/k_B T} - 1} = \frac{f_\alpha(1 - f_{\alpha'})}{f_{\alpha'} - f_\alpha}, \quad (5.66)$$

onde estamos considerando o campo elétrico igual a zero, e portanto uma condição de equilíbrio na qual $T = T_e$. De (5.66) segue que o termo $f_\alpha(1 - f_{\alpha'}) + n_{\mathbf{q}}^j(f_\alpha - f_{\alpha'}) = 0$, e consequentemente $j_y^{(2)} = 0$, como queríamos demonstrar.

⁷Estamos partindo do pressuposto físico de que a população de elétrons é a mesma em qualquer sistema de referência.

⁸Esta condição deve ser satisfeita desde que a ausência de campo elétrico deve implicar ausência de corrente dissipativa.

Capítulo 6

Conclusões

Nesta dissertação estudamos o transporte não linear de elétrons no grafeno nas condições do efeito Hall quântico, ou seja, submetendo os portadores de carga a um campo magnético perpendicular e um campo elétrico finito paralelo ao plano. Admitimos que o único mecanismo de espalhamento desses elétrons é devido à interação com fônons acústicos longitudinais e transversais da rede cristalina.

O cálculo dos níveis de energia (chamados níveis de Landau), bem como das funções de onda que caracterizam os estados quânticos do Hamiltoniano de Dirac de um único elétron, revelou um comportamento não usual desses portadores no grafeno. Basicamente, o espectro dos níveis de Landau se estreitam à medida que o campo elétrico se aproxima do valor crítico $v_F B$ (isto é, $\eta \rightarrow 1$), culminando com o seu conseqüente colapso. Além disso, para valores do vetor de onda k_x diferentes de zero, a assimetria dos níveis de Landau aumenta com $\eta \rightarrow 1$, podendo ocorrer a mistura dos estados de elétrons e buracos, quando ambos os portadores possuem energias positivas. Esse comportamento anômalo dos níveis de energia não é observado em um gás de elétrons padrão bidimensional, sendo uma conseqüência direta da natureza relativística dos elétrons no grafeno.

A densidade de corrente dissipativa foi calculada considerando uma aproximação até segunda ordem dos operadores eletrônicos com relação à constante de interação elétron-fônon. O transporte dissipativo não linear exhibe apenas transições reais de energia,

caracterizadas pelas emissão ou absorção de fônons acústicos por elétrons, quando estes saltam para níveis de menor ou maior energia, respectivamente. Já no transporte não dissipativo, para o qual apenas a aproximação de ordem zero deve ser considerada, pode-se recuperar correta e naturalmente a expressão da condutividade Hall quantizada no grafeno, fortalecendo a nossa metodologia.

Apêndice A

Autofunções do Hamiltoniano de Dirac no espaço de Hilbert

Neste apêndice vamos determinar as autofunções $\langle y | n; \beta \rangle$ no espaço de Hilbert, justificando o aparecimento das autofunções do oscilador harmônico em (4.50) e (4.51), bem como o argumento (4.52).

Podemos reescrever o operador β^\dagger em termos dos operadores posição e momento:

$$\beta^\dagger = \frac{(1-\eta^2)^{1/4}}{\sqrt{2}l_B} \left[y - l_B^2 k_x + \kappa l_B \eta (1-\eta^2)^{-1/4} \sqrt{2n} - l_B^2 (1-\eta^2)^{-1/2} \frac{\partial}{\partial y} \right], \quad (\text{A.1})$$

ou mais apropriadamente,

$$\beta^\dagger = \zeta_{n,k_x}^\kappa - \frac{1}{2} \frac{d}{d\zeta_{n,k_x}^\kappa}, \quad (\text{A.2})$$

onde $\zeta_{n,k_x}^\kappa(y) = \frac{(1-\eta^2)^{1/4}}{l_B \sqrt{2}} \left[y - l_B^2 k_x + \kappa l_B \eta (1-\eta^2)^{-1/4} \sqrt{2n} \right]$.

Como $|n\rangle$ são autovetores do operador número $\beta^\dagger \beta$ com autovalores n , isto é, $\beta^\dagger \beta |n\rangle = n |n\rangle$, podemos escrever a seguinte equação diferencial de segunda ordem¹

$$\frac{d^2 \Phi_n(\zeta_{n,k_x}^\kappa)}{d\zeta_n^{\kappa 2}} + 2 \left[2n + 1 - 2 (\zeta_{n,k_x}^\kappa)^2 \right] \Phi_n(\zeta_{n,k_x}^\kappa) = 0, \quad (\text{A.3})$$

¹Para simplificar a notação consideramos $|n; \beta\rangle = |n\rangle$.

com $\Phi_n(\zeta_{n,k_x}^\kappa) = \langle \zeta_{n,k_x}^\kappa | n \rangle$. As soluções normalizadas da Eq. (A.3) no domínio da variável ζ_{n,k_x}^κ são dadas por,

$$\begin{aligned}
\Phi_0(\zeta_{0,k_x}^\kappa) &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-(\zeta_{0,k_x}^\kappa)^2} \\
\Phi_1(\zeta_{1,k_x}^\kappa) &= \frac{2}{\sqrt{1!}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \zeta_{1,k_x}^\kappa e^{-(\zeta_{1,k_x}^\kappa)^2} \\
\Phi_2(\zeta_{2,k_x}^\kappa) &= \frac{1}{\sqrt{2!}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} [4(\zeta_{2,k_x}^\kappa)^2 - 1] e^{-(\zeta_{2,k_x}^\kappa)^2} \\
\Phi_3(\zeta_{3,k_x}^\kappa) &= \frac{2}{\sqrt{3!}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} [4(\zeta_{3,k_x}^\kappa)^3 - 3(\zeta_{3,k_x}^\kappa)] e^{-(\zeta_{3,k_x}^\kappa)^2} \\
\Phi_4(\zeta_{4,k_x}^\kappa) &= \frac{1}{\sqrt{4!}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} [16(\zeta_{4,k_x}^\kappa)^4 - 24(\zeta_{4,k_x}^\kappa)^2 + 3] e^{-(\zeta_{4,k_x}^\kappa)^2} \\
&\vdots \\
\Phi_n(\zeta_{n,k_x}^\kappa) &= \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \widetilde{H}_n(\zeta_{n,k_x}^\kappa) e^{-(\zeta_{n,k_x}^\kappa)^2}, \text{ se } n \text{ é par} \\ \frac{2}{\sqrt{n!}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \widetilde{H}_n(\zeta_{n,k_x}^\kappa) e^{-(\zeta_{n,k_x}^\kappa)^2}, \text{ se } n \text{ é ímpar} \end{array} \right\}, \tag{A.4}
\end{aligned}$$

onde os polinômios \widetilde{H}_n são obtidos pela fórmula recursiva

$$\widetilde{H}_{n+1}(x) = \left\{ \begin{array}{l} x\widetilde{H}_n(x) - n\widetilde{H}_{n-1}(x), \text{ se } n \text{ é par} \\ 4x\widetilde{H}_n(x) - n\widetilde{H}_{n-1}(x), \text{ se } n \text{ é ímpar} \end{array} \right\}. \tag{A.5}$$

Repare que os polinômios \widetilde{H}_n não correspondem exatamente aos polinômios de Hermite. Vamos considerar então a mudança de variável $\zeta_{n,k_x}^\kappa = \frac{\widetilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B\sqrt{2}}$, cujo significado ficará mais claro logo abaixo. Reescrevendo as funções oscilatórias Φ_n para a nova variável $\widetilde{y}_{n,k_x}^\kappa$, obtemos

$$\begin{aligned}
\Phi_0(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) &= \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{l_B}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right)^2} \\
\Phi_1(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) &= \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{l_B}\sqrt{2}} \left(\frac{2\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right)^2} \\
\Phi_2(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) &= \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{l_B}\sqrt{2!2^2}} \left[4\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right)^2 - 2\right] e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right)^2} \\
\Phi_3(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) &= \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{l_B}\sqrt{3!2^3}} \left[8\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right)^3 - \frac{12\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right] e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right)^2} \\
\Phi_4(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) &= \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{l_B}\sqrt{4!2^4}} \left[16\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right)^4 - 48\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right)^2 + 12\right] e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right)^2} \\
&\vdots \\
\Phi_n(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) &= \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{l_B}\sqrt{n!2^n}} H_n\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa}{l_B}\right)^2}, \tag{A.6}
\end{aligned}$$

ou em função de y :

$$\Phi_n(y) = \frac{(1-\eta^2)^{1/8}}{\pi^{1/4}\sqrt{l_B}\sqrt{n!2^n}} H_n\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)}{l_B}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)}{l_B}\right)^2}. \tag{A.7}$$

Em (A.6), H_n corresponde ao n -ésimo polinômio de Hermite, de modo que as funções $\Phi_n(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa)$ representam os estados usuais normalizados do oscilador harmônico unidimensional, conforme havíamos afirmado no final da Seção 4.4. Isto justifica a mudança de variável para \tilde{y}_{n,k_x}^κ .

Apêndice B

Cálculo do elemento de matriz

$$\langle \alpha | y | \alpha \rangle$$

Temos que $\langle \alpha | y | \alpha \rangle = \int d\mathbf{r} \psi_\alpha^*(\mathbf{r}) y \psi_\alpha(\mathbf{r})$, onde $|\alpha\rangle = |n, k_x, \kappa\rangle$ e $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ é dado por (4.50). Então,

$$\langle \alpha | y | \alpha \rangle = \frac{\eta}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} y \left[\frac{2}{\eta} \Phi_n^2(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)) + \frac{2}{\eta} \Phi_{n-1}^2(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)) - 4\kappa \Phi_n(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)) \Phi_{n-1}(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa(y)) \right] dy.$$

Realizando a mudança de variável $\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa = (1 - \eta^2)^{1/4} [y - y_0^{n,\kappa}(k_x)]$, onde $y_0^{n,\kappa}(k_x) = l_B^2 k_x - \kappa \eta l_B (1 - \eta^2)^{-1/4} \sqrt{2n}$, obtemos

$$\begin{aligned} \langle \alpha | y | \alpha \rangle = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} & [(1 - \eta^2)^{-1/4} \tilde{y}_{n,k_x}^\kappa + y_0^{n,\kappa}(k_x)] [\Phi_n^2(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) + \Phi_{n-1}^2(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) \\ & - 2\eta\kappa \Phi_n(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) \Phi_{n-1}(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa)] d\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa. \end{aligned}$$

Mas $\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{y}_{n,k_x}^\kappa \Phi_n^2(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) d\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{y}_{n,k_x}^\kappa \Phi_{n-1}^2(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) d\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa = 0$ e $\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{y}_{n,k_x}^\kappa \Phi_n(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) \Phi_{n-1}(\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa) d\tilde{y}_{n,k_x}^\kappa = l_B \sqrt{n/2}$. Portanto,

$$\langle \alpha | y | \alpha \rangle = y_0^{n,\kappa}(k_x) - \frac{\eta l_B \kappa \sqrt{n}}{\sqrt{2} (1 - \eta^2)^{1/4}} \quad (\text{B.1})$$

Referências

- [1] A. K. Geim e K. S. Novoselov, *Nature Materials* **6**, 183 (2007).
- [2] H. Petroski. *The Pencil: A History of Design and Circumstance*. Alfred Knopf, New York (1989).
- [3] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva e A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [4] R. E. Peierls, *Ann. I. H. Poincare* **5**, 177 (1935).
- [5] L. D. Landau, *Phys. Z. Sowjetunion* **11**, 26 (1937).
- [6] L. D. Landau, E. M. Lifshitz. *Statistical Physics, Part I*. Pergamon, Oxford (1980).
- [7] N. D. Mermin, *Phys. Rev.* **176**, 250 (1968).
- [8] A. K. Geim, A. H. MacDonald, *Physics Today* **60**, 35 (2007).
- [9] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov e A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [10] K. S. Novoselov, D. Jiang, T. Booth, V. V. Khotkevich, S. M. Morozov e A. K. Geim, *PNAS* **102**, 10451 (2005).
- [11] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos e A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).

- [12] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Störmer e P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [13] N. M. R. Peres, F. Guinea e A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **73**, 125411 (2006).
- [14] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005).
- [15] K. S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H. L. Störmer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim e A. K. Geim, *Science* **315**, 1379 (2007).
- [16] G. W. Semenoff, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449 (1984).
- [17] E. Fradkin, *Phys. Rev. B* **33**, 3263 (1986).
- [18] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988).
- [19] A. Calogeracos e N. Dombey, *Contemp. Phys.* **40**, 313 (1999).
- [20] C. Itzykson e J. B. Zuber. *Quantum Field Theory*. Dover (2006).
- [21] O. G. Balev, *Fizika Tverdogo Tela* **32**, 871 (1990) [*Physics of the Solid State* **32**, 514 (1990)].
- [22] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Rinehart & Winston, New York (1976).
- [23] P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- [24] E. H. Hall, *Amer. J. Math.* **2**, 287 (1879).
- [25] S. Kawaji, T. Igarashi e J. Wakabayashi, *Prog. Theor. Phys.* **57**, 176 (1975).
- [26] K. v. Klitzing, G. Dorda e M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- [27] D. C. Tsui, H. Störmer e A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1559 (1982).
- [28] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1395 (1983).
- [29] W. Poirier e F. Schopfer, *Eur. Phys. J. Special Topics*, **172**, 207 (2009).

- [30] J. K. Jain, Phys. Rev. Lett. **63**, 199 (1989).
- [31] R. L. Willett, J. P. Eisenstein, H. L. Störmer, D. C. Tsui, A. C. Gossard e J. H. English, Phys. Rev. Lett. **59**, 1776 (1987).
- [32] G. Moore e N. Read, Nucl. Phys. B, **360**, 362 (1991).
- [33] M. Greiter, X.-G. Wen e F. Wilczek, Phys. Rev. Lett., **66**, 3205 (1991).
- [34] W. Pan, H. L. Stormer, D. C. Tsui, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin e K. W. West, Phys. Rev. Lett., **90**, 016801 (2003).
- [35] Y. Zhang, Z. Jiang, J. P. Small, M. S. Purewal, Y.-W. Tan, M. Fazlollahi, J. D. Chudow, J. A. Jaszczak, H. L. Störmer e P. Kim, Phys. Rev. Lett., **98**, 197403 (2006).
- [36] K. I. Bolotin, F. Ghahari, M. D. Shulman, H. L. Störmer e P. Kim, Nature **462**, 196 (2009).
- [37] X. Du, I. Skachko, F. Duerr, A. Luican e E. Y. Andrei, Nature **462**, 192 (2009).
- [38] V. Lukose, R. Shankar e G. Baskaran, Phys. Rev. Lett. **98**, 116802 (2007).
- [39] N. M. R. Peres e E. V. Castro, J. Phys. Condens. Matter **19**, 406231 (2007).
- [40] J. D. Jackson. Classical Electrodynamics. Wiley, 3rd, New York (1999).
- [41] L. D. Landau e E. M. Lifshitz. Quantum Mechanics Non-Relativistic Theory. Pergamon Press, 3rd, New York (1977).
- [42] L. Landau, Z. Phys. **64**, 629 (1930).
- [43] M. O. Goerbig. Quantum Hall Effects (Lecture notes of the Les Houches Summer School 2009 (Singapore Session) arXiv:0909.1998) (2009).
- [44] H. Ochoa, E. V. Castro, M. I. Katsnelson e F. Guinea, Phys. Rev. B **83**, 235416 (2011).

- [45] H. Suzuura e T. Ando, Phys. Rev. B **65**, 235412 (2002).
- [46] E. Mariani e F. v. Oppen, Phys. Rev. Lett. **100**, 076801 (2008); **100**, 249901(E) (2008).
- [47] E. Mariani e F. v. Oppen, Phys. Rev. B **82**, 195403 (2010).
- [48] E. N. Adams e T. D. Holstein, J. Phys. Chem. Solids **10**, 254 (1959).
- [49] P. M. Platzman e P. A. Wolff. Waves and Interactions in Solid State Plasma, Suppl. 13 to Solid State Phys., Academic Press, New York (1973).
- [50] C. Bloch e C. De Dominicis, Nucl. Phys. **7**, 459 (1956).
- [51] R. Kubo, M. Toda e N. Hashitsume. Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics, 2nd, Springer (1991).
- [52] J. Plemelj, Monatsh. Math. Phys. **19**, 205 (1908).