

Gustavo Henrique da Silva

**Sobre a topologia no efeito Hall quântico:**  
um passeio através da geometria diferencial e topologia

Uberlândia

2019



Gustavo Henrique da Silva

**Sobre a topologia no efeito Hall quântico:**  
um passeio através da geometria diferencial e topologia

Universidade Federal de Uberlândia  
Instituto de Física

Orientador: Prof. Dr. Gerson J. Ferreira

Uberlândia  
2019



GUSTAVO HENRIQUE DA SILVA

**Sobre a topologia no efeito Hall quântico:**  
um passeio através da geometria diferencial e topologia

---

Prof. Dr. Gerson J. Ferreira - UFU

---

Prof. Dr. Erick Piovesan - UFU

---

Prof. Dr. George Balster Martins - UFU

Uberlândia  
2019



# Agradecimentos

Agradeço, primeiramente a meus pais pelo apoio, seja financeiro, seja emocional ao longo dos anos, pois mesmo distantes sempre se preocuparam comigo. Um agradecimento mega-especial a minha avó Raimunda e meu avô Matias que não puderam me ver formar na Universidade, porém sempre me viram como um orgulho para a família. Tenho absoluta certeza que se eles pudessem estar aqui iam estar com brilhos nos olhos de tamanha alegria. As minhas irmãs Clarissa e Gabriela pelos momentos de descontrações, chateases e brigas que sempre tínhamos nas férias de verão e de inverno, sempre é bom dar um pausa para se divertir! Agradeço aos meus tios de Uberlândia (Warlen e Elina) que no primeiro ano de graduação acolheram-me em sua residência. Enfim agradeço a toda minha família (tios, primos e avós);

Agradeço, a minha namorada Ana Paula pelo apoio durante a graduação. Obrigado por toda ajuda e incentivo que me deu e, ainda, por me proporcionar momentos inesquecíveis... aos meus amigos que fiz durante a graduação aos quais sempre discutíamos sobre física e matemática, e não posso deixar de esquecer do Pokémon Go que nos divertíamos depois do almoço. Desejo à vocês uma carreira brilhante pela frente. Também aos amigos da minha cidade natal: Obrigado pelo apoio, em especial, um grande obrigado ao Diego por ter me presenteado com o livro Mecânica Quântica moderna do J. Sakurai, que foi muito útil em minha graduação!

Agradeço também a Universidade Federal de Uberlândia (UFU), ao Instituto de Física (INFIS) com seu corpo docente que contribuiu grandiosamente em minha formação acadêmica. Em especial ao meu orientador Gerson J. Ferreira que além de um ótimo professor foi um ótimo orientador. Quero também deixar um agradecimento ao Prof. Dr. Marcel Novais, pois em minha opinião, a disciplina de Mecânica Clássica I lecionada pelo mesmo, fora a melhor disciplina que cursei em minha graduação pelo modo de como ele proporcionava a turma uma maneira bela de refletir sobre as teorias da física. Por último e não menos importante, quero deixar um agradecimento à professora Adriana Rodrigues da faculdade de matemática pela ajuda em tópicos de Geometria Diferencial.



*Mirror, mirror of mine, unlock of my shadows  
Curious I for visiting the dungeon of the ancient memories of a world poet,  
are numbers and infites, countless ...  
(Joinster G.)*

*“Os encantos dessa sublime ciência se revelam apenas àqueles que tem coragem de ir a  
fundo nela.”  
(Carl F. Gauss)*



# Resumo

Se tivermos um sistema em que o autoestado do hamiltoniano é não degenerado, após uma evolução adiabática cíclica ele retornará ao seu estado inicial acrescido de uma fase devido a dinâmica do sistema e ainda também devido ao caminho traçado no espaço  $R$ , onde  $R$  é um espaço de parâmetros que retém memória de sua trajetória referente ao sistema de interesse. Se considerarmos essa trajetória uma curva fechada  $C$ , podemos afirmar que a fase geométrica é o fluxo de um campo que atravessa uma determinada superfície limitada por  $C$  e a fase de Berry pode ser reescrita usando o teorema de Stokes. Por fim temos ainda uma manifestação local de invariância das propriedades geométricas das funções de onda no espaço de parâmetros que é denominada curvatura de Berry. No contexto de semicondutores, estes desenvolvimentos mudaram nossa concepção da teoria de estrutura de bandas usual, que agora incorpora naturalmente questões da topologia das relações de dispersão e de seus autoestados. Na matemática, a topologia estuda propriedades que não são afetadas por deformações contínuas através de uma variedade topológica  $M$  e como estas propriedades de certa forma são constantes por transformações contínuas, podemos dizer que estas são invariantes topológicos. Em particular, Thouless, Kohmoto, Nightingale, den Nijs mostraram que na presença de campos magnéticos intensos, a quantização da condutividade do efeito Hall quântico pode ser compreendida em termos de um invariante topológico, o número de Chern, que é calculado através da integral da curvatura de Berry ao longo da zona de Brillouin e para poder calcular está integrar usa-se um teorema belíssimo da geometria diferencial que é sobretudo devido inicialmente a Gauss e Bonnet, e posteriormente, ao chinês Chern. Assim, pelo fato desse teorema conectar a geometria de uma superfície com sua topologia, conseguimos tirar informações da mesma simplesmente olhando sua topologia, a partir de uma grandeza denominada genus  $g$ , que é invariante por transformações contínuas. O genus que de modo grosseiro é o número de buracos contidos em uma superfície  $S$  fechada.

**Palavras-Chave:** Topologia. Geometria diferencial. Fase de Berry. Efeito Hall quântico. Invariantes topológicos. Números de Chern.



# Abstract

If we have a system where the Hamiltonian's self-state is non-degenerate, after a cyclic adiabatic evolution it will return to its initial state plus a phase. This is due to the dynamics of the system and also due to the path traced in  $R$ , where  $R$  is parameter space that retains memory of its path referring to the system of interest. If we consider this trajectory a closed curve  $C$ , we can say that geometric phase is the flux of a field that crosses a given surface bounded by  $C$  and Berry's phase can be rewritten using Stokes's theorem. Finally we have a local manifestation of invariance of the properties of wave functions in the parameter space which is called Berry curvature. In the context of semiconductors, these developments have changed our conception of the usual band structure theory, which now naturally incorporates issues of topology, dispersion relations, and their self-states. In mathematics, topology studies properties that are not affected by continuous deformations through a topological variety  $M$ , and since these properties are somewhat constant by continuous transformations we can say that these are topological invariants. In particular, Thouless, Kohmoto, Nightingale, den Nijs, they showed that in the presence of intense magnetic fields, the quantization of the quantum Hall conductivity can be understood in terms of a topological invariant, the Chern number; which is calculated by integral of the Berry curvature along the Brillouin zone, and to calculate this integral a beautiful differential theorem of geometry is used, which is primarily due initially to Gauss and Bonnet, and later to the Chinese Chern. Thus, because this theorem connects the geometry of a surface with its topology, we can derive information from it simply by looking at its topology, from a magnitude called genus  $g$ , which is invariant by continuous transformations. The genus which is roughly the number of holes contained in a closed surface.

**Keywords:** Topology. Differential Geometry. Berry phase. Quantum Hall effect. Topological invariants. Chern numbers.



# Lista de Figuras

Figura 1 – Exemplo de transformações contínuas. Aqui uma xícara pode topologicamente se transformar em um <i>donuts</i> sem a necessidade de rasgar ou colar a mesma <sup>[1]</sup> . . . . .	18
Figura 2 – Variedades diferenciáveis. Aqui temos uma variedade e estamos tomando cartas locais em $\mathbf{R}^2$ a partir das aplicações $f$ e $g$ <sup>[2]</sup> . . . . .	21
Figura 3 – Essa figura representa uma esfera $S^2$ composta por triângulos esféricos. As linhas onde estão assinaladas com setas representam curvas geodésicas <sup>[3]</sup> . . . . .	23
Figura 4 – Aqui temos triângulos formando uma esfera que diferentemente da figura 3, possuem triângulos com ângulos internos com soma igual a $\pi$ . Denominamos a superfície resultante dessa junção de triângulos esféricos <sup>[4]</sup> . . . . .	24
Figura 5 – Campos normais em um triângulo geodésico ideal $\Delta'$ . Aqui temos representados $n := \eta$ e $C := \zeta$ . . . . .	28
Figura 6 – Figura que mostra algumas superfícies e suas respectivas curvaturas principais, sendo que a única superfície que possui uma curvatura negativa é a sela <sup>[5]</sup> . . . . .	31
Figura 7 – Representação do teorema de Gaus-Bonnet em superfícies fechadas de genus $g = 0$ . . . . .	32
Figura 8 – Representação da invariância topologica do <i>genus</i> . <sup>[6]</sup> . . . . .	32
Figura 9 – Figura mostrando a relação entre a esfera de fermi e o <i>plot</i> $\varepsilon(k_F) \times K_F$ <sup>[7]</sup> . . . . .	37
Figura 10 – Fase de Berry em um sistema de dois níveis . . . . .	52

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>15</b>
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS</b>	<b>17</b>
<b>2.1</b>	<b>Topologia</b>	<b>17</b>
2.1.1	Espaço topológico	17
2.1.2	Invariantes Topológicos	19
<b>2.2</b>	<b>Variedades Diferenciáveis</b>	<b>20</b>
<b>2.3</b>	<b>Teorema Elegantissimum de Gauss</b>	<b>21</b>
<b>2.4</b>	<b>Teorema Egregium de Gauss</b>	<b>30</b>
<b>2.5</b>	<b>Teorema de Gauss-Bonnet</b>	<b>31</b>
<b>3</b>	<b>FUNDAMENTOS DE FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO</b>	<b>33</b>
<b>3.1</b>	<b>Teorema de Bloch</b>	<b>33</b>
<b>3.2</b>	<b>Rede Recíproca</b>	<b>34</b>
<b>3.3</b>	<b>Movimento dos elétrons na presença de campos magnéticos</b>	<b>36</b>
<b>3.4</b>	<b>Efeito Hall</b>	<b>39</b>
<b>4</b>	<b>FUNDAMENTOS DO EFEITO HALL QUÂNTICO</b>	<b>43</b>
<b>4.1</b>	<b>Aproximação adiabática</b>	<b>43</b>
<b>4.2</b>	<b>A fase de Berry</b>	<b>47</b>
<b>4.3</b>	<b>Fase de Berry para um sistema de Spin's</b>	<b>49</b>
<b>4.4</b>	<b>Efeito Hall quântico</b>	<b>52</b>
4.4.1	Níveis de Landau	52
4.4.2	Estados de Bloch na presença de um campo magnético uniforme	57
4.4.3	Quantização da condutância Hall $\sigma_H$	59
4.4.4	Chern number	63
<b>5</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	<b>65</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>67</b>

# 1 INTRODUÇÃO

A fundamentação teórica da descoberta das transições de fase e fases topológicas da matéria renderam recentemente o prêmio Nobel de 2016 a David Thouless, Duncan Haldane e Michael Kosterlitz [8, 9]. No contexto de semicondutores, estes desenvolvimentos mudaram nossa concepção da teoria de estrutura de bandas usual, que agora incorpora naturalmente questões da topologia das relações de dispersão e de seus autoestados. Na matemática, a topologia estuda propriedades que não são afetadas por deformações contínuas através de uma variedade algébrica e como estas propriedades de certa forma são constantes podemos dizer que elas são invariantes topológicos. Em particular [10] mostraram que na presença de campos magnéticos intensos, a quantização da condutividade do efeito Hall quântico (QHE) pode ser compreendida em termos de um invariante topológico, o número de Chern, que é calculado através da integral da curvatura de Berry. Mais recentemente, mostrou-se que a polarização elétrica [11] em um isolante também é definida pela curvatura de Berry e define um invariante topológico  $Z_2$  [12], que indica se existem ou não estados de borda topologicamente protegidos pelas simetrias do material.

A fase de Berry foi inicialmente proposta em 1984 pelo próprio Berry em seu artigo “*Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*” [13]. Neste trabalho ele argumenta que se tivermos um sistema em que o autoestado do hamiltoniano é não degenerado, após uma evolução cíclica ele retornará ao seu estado inicial acrescido de uma fase devido a dinâmica do sistema e ainda também devido ao caminho traçado no espaço  $X$ , onde  $X$  é um espaço de parâmetros, ou seja, que retém memória de sua trajetória em  $X$ . No entanto 1983, Berry já tinha publicado o artigo “*Holonomy, the Quantum Adiabatic Theorem, and Berry’s Phase*” [14, 15], onde ele fornece uma interpretação sobre essa contribuição geométrica.

O efeito Hall é um dos grandes resultados experimentais da física no século XIX. Este feito devido à Edwin Hall pode ser explicado teoricamente através da teoria eletromagnética clássica e dos modelos de elétrons livres que a sociedade científica daquela época continha [16]. Em decorrer das ferramentas que os cientistas possuíam naquela época, eles conseguiam calcular certas grandezas que surgiam quando um material metálico, por exemplo, uma folha metálica estava sujeita a um campo elétrico contido num plano transversal e um campo magnético perpendicular a este plano. Esta folha por se metálica possui portadores de carga (um exemplo bem simples de portadores de carga são os elétrons) e que estes sob influência da força de Lorentz, ao se mover, irão induzir uma diferença de potencial na folha que é denominada de *potencial Hall*. A partir do potencial Hall podemos determinar outras grandezas, dentre estas uma muito interessante que é a *condutância hall*.

Um século depois da descoberta do efeito Hall por Edwin Hall, Klaus von Klitzing, G. e colaboradores [17] mostraram que ao manter uma amostra bidimensional de elétrons a baixas

temperaturas sob influência de um campo magnético intenso a condutividade Hall não apresentava um comportamento linear com a variação campo magnético como esperado no efeito Hall e sim era quantizada em *plateaus* da forma de múltiplos inteiros da quantidade  $e^2/h$ . Essa descoberta rendeu a Von Klitzing o prêmio nobel do ano de 1985. Na época a comunidade científica se dedicou a buscar explicações teóricas para o assim chamado *efeito Hall quântico inteiro*. Então em 1981 Laughlin <sup>[18]</sup> propôs espertamente um experimento onde fora introduzido alguns conceitos de topologia que o levou a conjecturar que estes *plateaus* da condutividade Hall podiam ser explicados em termos das fases geométricas e da invariância de Gauge, isto é, considerar que os *plateaus* fazem parte de um invariante topológico do sistema, que no caso era o múltiplo inteiro  $n$  denominados denominado número de Chern.

Os números de Chern são números inteiros usados para distinguir estruturas invariantes em uma variedade topológica  $M$  <sup>[19]</sup>. Eles são em homenagem ao matemático chinês **Shiing-Shen Chern** (1911-2004) que realizou contribuições importantes na área da geometria diferencial e da topologia. A curvatura de Berry é calculada em um espaço de parâmetros  $\mathbf{R}$  e este, por sua vez, pode ser considerado uma variedade  $M$ . Ao olhar para um teorema muito belo da geometria diferencial devido a **Johann Carl Friedrich Gauss** (1777 - 1855) e a **Pierre Ossian Bonnet** (1819-1892) observa-se uma relação intrínseca com a curvatura de uma dada superfície com seu invariante topológico que a característica de Euler  $\chi$ . Chern, porém conseguiu relacionar o inteiro  $n$  ao  $\chi$  e mostrou que  $n$  é um invariante topológico <sup>[20]</sup>.

Neste trabalho decidimos investigar como surge o invariante topológico número de Chern  $n$  no QHE. As motivações a cerca do tema escolhido como propósito de estudo se baseia no fato de que não há textos, em português principalmente, na literatura que falam sobre o tema de uma maneira que os alunos da graduação possam ler de forma fácil. Então introduzimos conceitos, com um ponto de vista pedagógico, para que os estudantes de graduação que se interessarem pelo tema em questão, possam ler com um certo grau de facilidade. Outro ponto que me motivou bastante a cerca do assunto é o fato de introduzir de maneira rigorosa certos conceitos matemáticos que são de extrema relevância para o entendimento de geometria diferencial e topologia geral que são usados na física, entretanto muitas vezes passam despercebidos pelos físicos no dia a dia. O trabalho foi dividido em três partes que se enquadram em um desenvolvimento teórico que são: *i*. Fundamentos matemáticos; *ii*. Fundamentos de física do estado sólido; *iii*. Fundamentos do efeito Hall quântico e por fim temos a conclusão e referências.

Sugerimos ao estudante que tenha como foco uma leitura rápida sobre o estudo do efeito Hall quântico pular o capítulo 2, pois este tem um enfoque bastante matemático.

## 2 Fundamentos Matemáticos

### 2.1 Topologia

#### 2.1.1 Espaço topológico

Quando estamos estudando topologia consideramos certos conjuntos que permitem a noção de continuidade. Isso começou a partir do estudo dos conjuntos abertos contidos em  $\mathbf{R}^n$ , aos quais podemos introduzir a noção de métrica. Para exemplificar essa ideia de maneira simples, vamos considerar o plano  $\mathbf{R}^2$  tomar uma circunferência  $S^1$  centrada na origem  $(0,0)$  da forma

$$S^1 = \{(x, y) \in \mathbf{R}^2 : d((x, y), (0, 0)) = \varepsilon\}, \quad (2.1)$$

onde como sabemos de geometria analítica que  $d((x, y), (0, 0)) = \sqrt{x^2 + y^2}$ . Aqui temos que  $d$  pode ser considerada uma métrica para  $\mathbf{R}^2$ .

**Definição 2.1.1** *Sejam  $M$  um conjunto não vazio,  $d : M \times M \rightarrow \mathbb{R}$  é uma métrica em  $M$  se, e somente se, para todo  $x, y$  e  $z \in M$  as seguintes propriedades são satisfeitas:*

1.  $d(x, y) = 0 \iff x = y$ ;
2.  $d(x, y) = d(y, x) \forall x, y \in M$ ;
3.  $d(x, y) \leq d(x, z) + d(z, y)$  (*desigualdade triangular*);

e o par  $(M, d)$  é denominado espaço métrico.

Agora que temos noção do que é um espaço métrico podemos definir bolas abertas.

**Definição 2.1.2** *Uma bola aberta em um espaço métrico  $M$  com centro no ponto  $y$  e raio  $\varepsilon$  é dada por  $B(x, \varepsilon) = \{y \in M : d(x, y) < \varepsilon\}$ .*

Na definição acima usamos o fato de ser  $< \varepsilon$  e não  $\leq \varepsilon$ , pois ao considerar o segundo caso estaríamos impondo que a bola possui uma fronteira, denominada por bordo  $\partial M$  e isso implicaria que a bola seria fechada e não aberta. A partir dessa definição podemos notar que toda bola é aberta, pois temos que toda bola  $B(x_0, \varepsilon_0) \subset S^1$ , onde  $S^1$  é círculo contido em  $\mathbf{R}^2$ . Uma consequência da definição de bolas abertas é que em um espaço métrico podemos dizer que um conjunto  $U$  é aberto se para cada ponto  $p \in U$  temos que  $p$  é centro de uma bola aberta contida em  $M$ . Essas bolas abertas formam um base para  $(M, d)$  pelo fato que  $U = \cup_i B_i(x, \varepsilon)$ .

A importância dos espaços topológicos se dá no fato que na física sempre queremos estudar coisas que são localmente euclidianas, mesmo que estas sejam  $m$ -dimensionais. Podemos ver um espaço topológico como a generalização de um espaço métrico e isso só torna fundamental



Figura 1 – Exemplo de transformações contínuas. Aqui uma xícara pode topologicamente se transformar em um *donuts* sem a necessidade de rasgar ou colar a mesma <sup>[1]</sup>.

para noções dos conceitos de continuidade e convergência. Em topologia queremos fixar um determinado espaço topológico e estudar suas propriedades que não mudam por deformações contínuas e ao estudar esses espaços temos que ter em mente que vamos analisar também os seus subconjuntos, também conhecidos como “figuras”. Por deformações contínuas intuitivamente estamos nos referindo aquelas transformações que não “cortam” ou “colam” um determinado ponto a um subconjunto de uma figura, um exemplo disso é ao olharmos para uma esfera e tomarmos um ponto  $p$  que oscula um subconjunto  $A$ . Se partimos a esfera em dois hemisférios de uma maneira bem precisa, tal que o  $p$  se separe de  $A$ , imediatamente vemos que essa transformação não é contínua, pois antes havia apenas uma parte que era a esfera e depois observamos duas partes que são os hemisférios. Por outro lado o caso oposto que seria colar dois hemisférios com o propósito de se obter uma esfera também não é uma transformação contínua pelo mesmo argumento.

Para introduzir uma topologia, ou seja, uma possibilidade de saber quando um ponto está colado a um conjunto, temos que introduzir uma operação que nos diz quando um ponto está grudado a um subconjunto  $A$ . Dado um conjunto  $X$  podemos definir um conjunto formado pelos subconjuntos de  $X$  denominado partes de  $X$  denotado por  $P(X)$ . A partir dessa definição podemos introduzir uma operação  $\varphi : P(X) \rightarrow P(X)$  que dado um conjunto  $X$  nos informa qual é a família de pontos  $\overline{A}$  colados a  $A$ . A partir disso já podemos ter uma breve noção de continuidade, pois de fato uma transformação  $f : X \rightarrow Y$  é contínua se, e somente se, ela manda os pontos os pontos colados a  $A$  a imagem dos pontos grudados a  $A$ , que matematicamente quer dizer que  $f(\overline{A}) = \overline{f(A)}$ .

Existem certas propriedades que são axiomas e queremos que valha para a operação introduzida acima e que valem a pena serem enunciarmos:

1. A primeira delas é que não há nenhum ponto grudado no conjunto dos vazios  $\emptyset$ , sendo assim temos que  $\overline{\emptyset} = \emptyset$ ;
2. Se um ponto pertence a  $A$ , isso implica que  $A \subset \overline{A}$ ;

3. Se um ponto está colado aos pontos que estão colados a  $A$ , logo ele está colado a  $A$  também, ou seja  $\overline{\overline{A}} = \overline{A}$ ;
4. Dados dois conjuntos  $A$  e  $B$ , temos que  $p \in A$  ou  $p \in B$  e disso decorre que  $\overline{A \cup B} = \overline{A} \cup \overline{B}$ ;

**Definição 2.1.3** *Seja o conjunto  $C$  e  $\tau$  o subconjunto formado pelas partes de  $C$ , denominado  $\mathcal{P}(C)$ , então  $\tau$  é uma topologia em  $C$  se é satisfaz as seguintes propriedades*

1.  $\emptyset, C \in \tau$ ;
2.  $U_\lambda \in \tau, \lambda \in \Lambda \implies \cup_{\lambda \in \Lambda} U_\lambda \in \tau$ ;
3.  $U_\lambda \in \tau, 1 < \lambda < m \implies \cap_{\lambda=1}^m U_\lambda \in \tau$ ;

O item 1 da definição acima nos diz que para ter uma topologia no conjunto  $C$ , o vazio e o próprio conjunto  $C$  devem pertencer a topologia  $\tau$ . Com os itens 2 e 3 queremos dizer que a união de abertos são abertos e que a interseção de abertos são abertos.

Notemos que  $\tau$  é composto por uma família de abertos, logo o par  $(X, \tau)$  é dito espaço topológico, mas para abreviar notação, usualmente denotaremos  $X$  por espaço topológico [21]. Quando for o caso de usar alguma outra letra para denotar  $X$  iremos enfatizar previamente.

## 2.1.2 Invariantes Topológicos

Invariantes topológicos são propriedades de um determinado espaço topológico que é preservada por homeomorfismos. Dentre estas temos a conexividade, compacidade e o número de componentes conexas. Uma função  $f$  pode ser dita um invariante topológico se os objetos  $f(x)$  e  $g(y)$  forem isomorfos quando  $X$  e  $Y$  forem homeomorfos.

**Definição 2.1.4** *Sejam  $X$  e  $M$  espaços topológicos e um aberto  $U \subset M$ . Uma função  $f : X \longrightarrow M$  é dita contínua se a imagem inversa de qualquer aberto  $F^{-1}(U)$  é aberta em  $X$ . Dizemos ainda que  $f$  é um homeomorfismo se  $f$  é contínua, bijetora e possui inversa contínua.*

**Definição 2.1.5** *Um espaço topológico  $X$  é conexo por caminhos se dados  $p, q \in X$ , existe um caminho em  $X$  conectando  $p$  a  $q$ . Um caminho em  $X$  é definido por uma função contínua  $f \in I = [0, 1]$ .*

Para exemplificar vamos mostrar que a bola aberta  $B(x, \varepsilon)$  em  $\mathbf{R}^n$  é homeomorfa ao  $\mathbf{R}^n$ . Se tomarmos quaisquer bolas contidas em  $\mathbf{R}^n$ , temos que elas são homeomorfas entre si, logo basta mostrar que a bola  $B(0, 1)$  é homeomorfa a  $B(x, \varepsilon)$ .

Seja função  $f : B(0, 1) \longrightarrow \mathbf{R}^n$  definida por

$$f(x) = \frac{x}{1 - \|x\|} \quad (2.2)$$

como  $f$  é racional ela possui bijeção contínua. Sua inversa  $g : \mathbf{R}^n \longrightarrow B(0, 1)$  é dada por

$$g(y) = \frac{y}{1 + \|y\|} \quad (2.3)$$

que é contínua e bijetora (pois de fato  $g(y)$  também é racional).

Como  $h : B(x, \varepsilon) \longrightarrow B(0, 1)$ , que é dada por  $h(y) = \varepsilon y - x$  é um homeomorfismo, então qualquer bola em  $\mathbf{R}^n$  é homeomorfa à  $\mathbf{R}^n$ .

Seja  $X$  um espaço topológico e  $x_0 \in X$ . Podemos associar a esse espaço um grupo, denominado por grupo fundamental, que se constitui das classes de equivalência entre laços em  $X$  com base em  $x_0$ . Mais adiante comentaremos brevemente sobre o que são esses laços. O grupo fundamental pode ser considerado um invariante topológico pelo fato que se dois espaços  $X$  e  $Y$  são homeomorfos, seus grupos fundamentais serão isomorfos.

**Definição 2.1.6 (Laço)** *Sejam  $X$  um espaço topológico e  $x_0$  um ponto fixo de  $X$ . Um laço é uma função contínua  $\lambda : I = [0, 1] \longrightarrow X$ , tal que  $\lambda(0) = \lambda(1) = x_0$ . E vamos denotar  $\omega(X, x_0)$  o conjunto de todos os laços  $\{\lambda : I \longrightarrow X\}$ .*

Em topologia queremos saber se um espaço pode ser continuamente deformado e para isso associamos o conceito de homotopia. Existe um teorema que diz que a relação de homotopia é também uma relação de equivalência e isso se torna importante para enfatizar que os grupos homotópicos são invariantes topológicos [22].

O conjunto das classes de homotopia é um número inteiro e em um caminho fechado mede o número de voltas em uma determinada superfície. Esse conjunto não forma um grupo segundo a operação produto entre caminhos definida por  $*$ , pois o produto entre duas classes não está sempre bem definido [23, 22]. Por outro lado se tomarmos um ponto base fixo  $x_0$  em  $X$  e olharmos apenas para os caminhos que começam e terminam nesse ponto base fixado, temos que este laço irá formar um grupo que pode satisfazer a operação  $*$ , que é grupo fundamental, daí está a importância de definirmos a função laço.

Uma propriedade bem interessante do grupo fundamental é que ele está relacionado com a geometria das variedades topológicas e a está conexão entre topologia e geometria é atribuída à característica de Euler, a qual vamos comentar mais adiante.

## 2.2 Variedades Diferenciáveis

Definições para construir um alicerce para compreensão de variedades diferenciáveis:

**Definição 2.2.1** *Seja  $C$  um espaço topológico e  $\tau \subset P(C)$ , se diz que  $C$  é Hausdorff ( $T_2$ ) se para todo  $p, q \in C$ , onde  $p \neq q$ ,  $\exists U_p, U_q \in \tau$ , tal que  $p \in U_p, q \in U_q \implies U_p \cap U_q = \emptyset$ .*

**Definição 2.2.2** *Uma base de  $(C, \tau)$  é uma coleção  $B = \{U_p, \mathbf{x}_p\}$  e sendo  $U_p \in \tau$ , tal que para todo  $U \in \tau$  existe um subconjunto  $\Lambda' \in \Lambda$  tal que  $U = \bigcup_{p \in \Lambda'} U_p$ .*

**Definição 2.2.3**  $C$  é localmente euclidiano se para  $p \in C$  existe  $U \in \tau$ , onde  $p \in U$  e existe uma função  $\varphi : U \rightarrow \varphi(U) \subset \mathbf{R}^n$ , tal que  $\varphi(U)$  é um aberto de  $\mathbf{R}^n$  e  $\varphi : U \rightarrow \varphi(U)$  é um homeomorfismo.

**Definição 2.2.4** Uma variedade topológica  $M$  é um espaço topológico  $C$  tal que:  $M$  é Hausdorff, possui uma base enumerável e é localmente euclidiano.

**Definição 2.2.5** Dizemos que  $\mathcal{A}$  é um atlas maximal se para todo  $\varphi : U \rightarrow \varphi(U) \subset \mathbf{R}^n$  for um homeomorfismo, tal que  $\varphi_v \in \mathcal{A}$ , tal que  $V \cap U = W \neq \emptyset \rightarrow \varphi_v \circ \varphi^{-1}|_{\varphi(W)}, \varphi \circ \varphi_v^{-1}|_{\varphi(W)}$

Com base nestas variedades topológicas, definimos as variedades diferenciáveis [24, 25].

**Definição 2.2.6** Uma variedade diferencial é uma variedade topológica + um Atlas maximal.

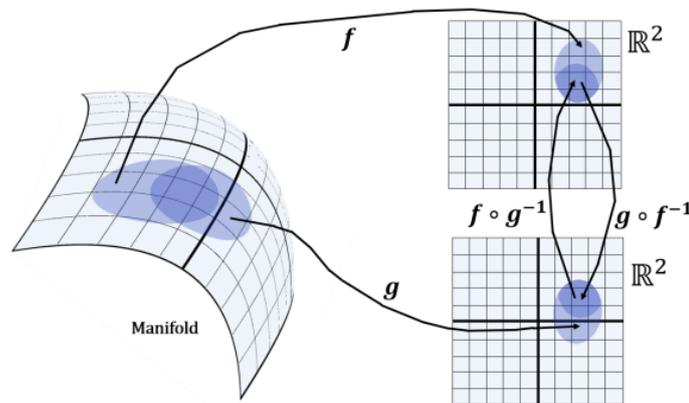


Figura 2 – Variedades diferenciáveis. Aqui temos uma variedade e estamos tomando cartas locais em  $\mathbf{R}^2$  a partir das aplicações  $f$  e  $g$  [2].

## 2.3 Teorema Elegantissimum de Gauss

Existem dois resultados clássicos na geometria elementar que são bastante poupáveis para até três dimensões. Desde o ensino médio aprendemos nas aulas de matemática que a soma dos ângulos internos de um triângulo devem ser  $180^\circ$  ou  $\pi$ . O outro resultado, que não pode ser tão óbvio, é para um triângulo contido num plano  $S^2$  onde seus lados são comprimentos de arcos a soma dos ângulos internos devem ser maior  $\pi$ . Em decorrer destes resultados podemos nos questionar sobre um relação direta que nos de uma informação sobre os ângulos de um triângulo geodésico  $\Delta$ . Gauss foi um gênio da matemática e ao se deparar com o problema sugeriu a seguinte relação

$$\int_{\Delta} K = \sum_i \theta_i - \pi . \quad (2.4)$$

A integral de  $K$  é basicamente a integral de uma função contínua e limitada definida sobre um conjunto  $j$ -mensurável  $\mathcal{R} \subset S$ . Quando  $\mathcal{R}$  está contido numa vizinhança  $X(U)$ , podemos definir

$$\int_{\mathcal{R}} f = \int_{X^{-1}(\mathcal{R})} (f \circ X) \|X_u \wedge X_v\| du dv, \quad (2.5)$$

Mas para o caso geral podemos fazer um  $j$ -decomposição dessa integral, ou seja

$$\int_{\mathcal{R}} f = \sum_i \int_{\mathcal{R}_i} f. \quad (2.6)$$

Voltando aos resultados clássicos que já introduzimos, podemos perceber que se estivermos no plano  $S$ , então  $K = 0$  e se estivermos em  $S^2$  teremos que  $K = 1$ . Sendo assim a partir da fórmula introduzida por Gauss podemos obter para o primeiro caso  $\sum_i \theta_i = \pi$  e para o segundo caso  $\sum_i \theta_i = \pi + \mu(\Delta)$ . Portanto a fórmula de Gauss generaliza de forma precisa a noção da soma dos ângulos internos de um superfície  $S \subset \mathbf{R}^n$ .

Antes de introduzirmos o teorema elegantissimum de Gauss vamos introduzir o conceito de superfície regulares, de geodésicas e triângulos geodésicos.

**Definição 2.3.1** *Uma superfície é denominada regular  $S \subset \mathbf{R}^3$  se para todo  $p \in S$ , existe uma vizinhança  $V$  de  $p$  em  $\mathbf{R}^3$  e uma aplicação  $\mathbf{x} : U \subset \mathbf{R}^2 \rightarrow V \cap S$  tais que:*

1.  $\mathbf{x}$  é um homeomorfismo diferenciável;
2.  $d\mathbf{x}_q : \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R}^2$  é biunívoca para todo  $q \in U$ ;

**Definição 2.3.2 (Geodésica)** *Seja  $\gamma : I \subset \mathbf{R} \rightarrow S$  uma curva parametrizada e diferenciável contida em  $S$ , temos que  $\gamma$  é denominada uma geodésica parametrizada se a componente tangencial de seu vetor aceleração for nula, isto é, para todo  $t \in I$ ,  $\gamma''(t)$  é ortogonal ao plano tangente  $T_p S$ , onde  $p = \gamma(t)$ . Disto, uma curva regular  $C \subset S$  é chamada de geodésica se para cada ponto  $p$ , encontramos uma parametrização local de  $C$  em  $p$ , tal que possamos escrever  $\gamma : I \subset \mathbf{R} \rightarrow C \subset S$ .*

Na geometria euclidiana temos que a menor distância de um ponto  $p$  a um ponto  $q$  é uma reta, a qual defini-se essa distância a partir da métrica euclidiana e obtemos  $d = |\sqrt{x^2 + y^2}|$ . Em geometria diferencial geralmente se é estudado superfícies a qual esta definição de distância não se aplica. Podemos observar isso ao pegarmos dois pontos equidistantes sobre a casca de uma esfera. Ao ligarmos os dois pontos, temos que a menor distância entre eles não poderá ser uma reta, pois para ser uma curva reta teríamos que cortar a esfera em um plano, logo a menor distância será uma curvatura parametrizada por um comprimento de arco.

**Definição 2.3.3 (Triângulo geodésico)** *Um triângulo geodésico contido em uma superfície regular  $S$  é um subconjunto  $\Delta$  de  $S$  homeomorfo a bola fechada  $B_r(\varepsilon) = \{x, y \in \mathbf{R}^2 : x^2 + y^2 \leq \varepsilon\}$*

contida em  $\mathbf{R}^2$  e seu bordo  $\partial\Delta$  é o traço de uma curva contínua  $\gamma : I \subset \mathbf{R} \rightarrow S$  que goza das seguintes propriedades:

1.  $I = [a_0, a_1] \cup [a_1, a_2] \cup [a_2, a_3]$  onde  $a_0 < a_1 < a_1 < a_2 \in \mathbf{R}$ ;
2.  $\gamma(a_0) = \gamma(a_3)$ ;
3.  $\gamma|_{[a_0, a_3)}$  é injetiva;
4. para  $i = 1, 2, 3$  temos que  $\gamma_{-a_{i-1}, a_i}$  é uma curva geodésica de  $S$  que podemos tomar um intervalo estendido por  $\epsilon_i > 0$ , da forma que  $I = (a_{i-1} - \epsilon_i, a_i + \epsilon_i)$  de modo que os vetores tangentes a essas curvas em um determinado ponto estão bem definidos.

Na figura 3 podemos observar uma superfície esférica resultante da reunião de triângulos geodésicos ideais compostos de curvas geodésicas. Já na figura 4 temos uma superfície resultante da reunião de triângulos aos quais estamos familiarizadas desde o ensino primário. Existe uma certa categoria de triângulos denotados por triângulo geodésicos ideais. Vamos desenvolver o teorema em torno desta classe de triângulos.

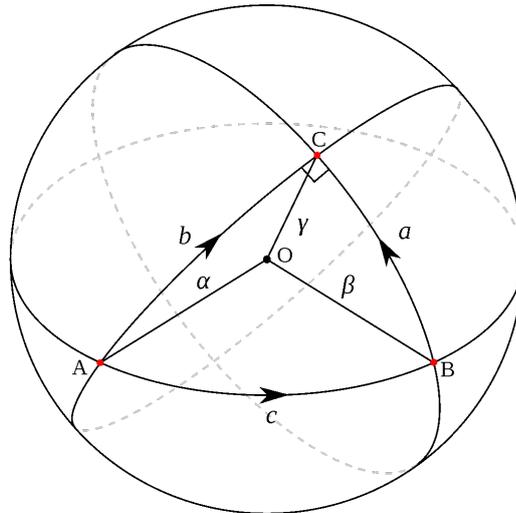


Figura 3 – Essa figura representa uma esfera  $S^2$  composta por triângulos esféricos. As linhas onde estão assinaladas com setas representam curvas geodésicas [3]

**Definição 2.3.4 (Triângulo geodésico ideal  $\Delta$ )** Um triângulo é dito geodésico ideal  $\Delta$  de uma superfície regular  $S$  se ele está contido na intersecção de bolas geodésicas com os centros em seus vértices.

Pelo fato deste estar contido numa bola geodésica, então ele está contido numa vizinhança parametrizada  $X(U) \subset S$  e da condição que  $X^{-1}(U) \subset S$  é homeomorfa a bola aberta em  $\mathbf{R}^2$  implica que  $\Delta$  é  $j$ -mensurável.

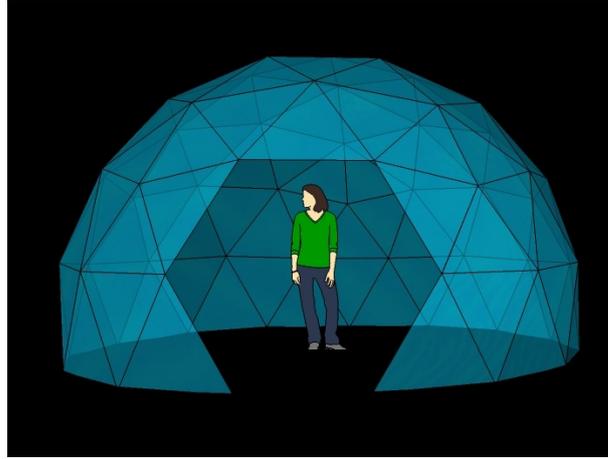


Figura 4 – Aqui temos triângulos formando uma esfera que diferentemente da figura 3, possuem triângulos com ângulos internos com soma igual a  $\pi$ . Denominamos a superfície resultante dessa junção de triângulos esféricos <sup>[4]</sup>.

**Lemma .1** *Sejam  $\Delta$  triângulos geodésicos ideais de uma superfície regular  $S$  e  $p$  um vértice de  $\Delta$ . Então para todo ponto  $q$  oposto do lado de  $\Delta$  a  $p$  existe uma geodésica radial de  $p$  a  $q$  a qual está contida em  $\Delta$ .*

**Demonstração 1** *Seja  $\gamma : [a, b] \rightarrow S$  uma geodésica do lado oposto a  $p \in \Delta$ . Podemos introduzir uma parametrização local em um sistema de coordenadas polares de forma  $X(U) : U \subset \mathbf{R}^2 \rightarrow S$  tal que  $X(U) = X(\rho, \theta) = e_p^{\rho\omega(\theta)}$ . Como queremos mostrar a existência de uma geodésica radial devemos levar em consideração que  $\Delta - \{p\} \subset X(U)$ . Tomando em um uma curva  $\alpha(s) = (\rho(s), \theta(s)) = X^{-1}(X(\alpha(s))) = X^{-1}(\gamma(s))$ . Então para todo  $s \in (a, b)$ , existe uma derivada de  $\gamma(s)$  que podemos escrever como*

$$\gamma'(s) = X(\rho'(s)(\rho(s), \theta(s)) + \theta'(s)(\rho(s), \theta(s))) \quad (2.7)$$

$$= X_\rho(\rho'(s)(\rho(s), \theta(s))) + X_\theta(\theta'(s)(\rho(s), \theta(s))) . \quad (2.8)$$

*A aplicação radial  $X_\rho$  que surge da derivada de  $\gamma(s)$  é o vetor velocidade radial da geodésica que cola  $p$  a  $\gamma(s)$  no ponto  $\gamma(s)$ . Vale ressaltar que geodésicas se interceptam transversalmente. Logo o vetor velocidade  $\alpha(s)$  nunca é horizontal, o que explica que sua trajetória é uma função do tipo  $\rho = \rho(\theta) \in I_{a,b} = [\theta(a), \theta(b)]$ .*

*A partir dessas considerações podemos observar que  $X^{-1}(\Delta)$  é a região de  $U$  delimitada pelo intervalo  $I_{a,b}$  tendo como função  $\rho(\theta)$  e ainda, restrita as curvas horizontais  $\theta(s) = \theta(a)$  e  $\theta(s) = \theta(b)$ , com  $s \in [a, b]$ . Então para toda  $q = \gamma(s_0)$  com  $s_0 \in [a, b]$ , existe um  $\theta_0$  localizado entre  $\theta_a$  e  $\theta_b$  tal que podemos escrever  $q = X(\rho(\theta_0), \theta_0)$ . E além disso temos que  $\rho$  está restrito a variar até um  $\max \theta_0$ , sendo assim  $\rho \in [0, \rho(\theta)]$  e disso tiramos  $(\rho, \theta_0) \in X^{-1}$ , que implica a existência de uma geodésica radial*

$$\rho \rightarrow X(\rho, \theta_0) \text{ com } 0 \leq \rho \leq \rho(\theta_0) \quad (2.9)$$

*que une o ponto  $p$  ao seu ponto oposto  $q = \gamma(s_0) \in \Delta$ .*

**Lemma .2** *Seja  $\Delta$  um triângulo ideal em  $S$  com vértices  $p_i$ , onde  $i = 1, 2, 3$ . Suponha que existe a seqüência  $(q_n)_{n \in \mathbf{N}}$  sobre o lado  $p_1 p_3$ , tal que  $q_n \rightarrow p_1$ . Então denotando  $\Delta_n \subset \Delta$  o triângulo geodésico com os vértices  $p_1, p_2, q_n$  possui*

1.  $p_1 \hat{p}_2 q_n \rightarrow 0$
2.  $p_2 \hat{q}_n p_3 \rightarrow p_1$
3.  $\mu(\Delta_n) \rightarrow 0$

**Demonstração 2** *Denotando por  $\gamma_w$  a geodésica contida na superfície regular que tem origem a partir de  $p_2$  com velocidade  $w \in T_{p_2} S$ . Existe um  $\epsilon$  e um  $\delta$ , ambos positivos, tal que a aplicação*

$$\varphi(t, w) = \gamma_w(t), \quad |t| < \epsilon, \quad \|w\| < \delta \quad (2.10)$$

*está bem definida e ainda é diferenciável ao longo do intervalo  $(-\epsilon, \epsilon) \subset B_\delta$ . Aqui  $B_\delta$  é a bola geodésica de raio  $\delta$  contida no plano tangente a superfície regular  $S$ . Temos que por hipótese que  $\Delta$  está contido numa bola geodésica de  $S$  com centro em  $p_2$ , sendo assim para todo  $n \in \mathbf{N}$  existem  $t_n \in (-\epsilon, \epsilon)$  e  $w_n \in B_\delta$ , tais que:*

$$q_n = \gamma_{w_n}(t_n) = \varphi(t_n, w_n). \quad (2.11)$$

*Uma vez que  $t_n$  e  $w_n$  são seqüências limitadas, podemos dizer que  $(T_n, w_n) \rightarrow (t_0, w_0)$ . Vamos nos apoderar desse fato e de que  $\varphi$  é contínua e limitada, logo podemos escrever*

$$\gamma_{w_0} = \varphi(t_0, w_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi(t_n, w_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} q_n = p_1. \quad (2.12)$$

*Em particular temos que  $p_1 \hat{q}_n p_2$  deve ser menor que ângulo formado por  $\angle(w_n, w_0)$ , sendo assim podemos aplicar o limite*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} p_1 \hat{q}_n p_2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \angle(w_n, w_0) = \angle(w_0, w_0) = 0, \quad (2.13)$$

*logo provamos o item i.*

*Para cada  $n \in \mathbf{N}$  vamos obter um geodésica  $\gamma_{w_n}(t) = \exp_{p_2}\{t w_n\}$ , onde  $t \in (-\epsilon, \epsilon)$ . Então  $\gamma'_{w_n}(t_n) = (d/dt_n) \exp_{p_2}\{t w_n\} = w_n \exp_{p_2}\{t_n w_n\}$ , o que implica ao tomarmos o limite temos*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \gamma'_{w_n}(t_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} w_n \exp_{p_2}\{t_n w_n\} = w_0 \exp_{p_2}\{t_0 w_0\} = \gamma'_{w_0}(t_0). \quad (2.14)$$

*Considerando a geodésica de  $S$  que liga  $p_1$  a  $p_3$  denotada por  $\gamma : I \subset \mathbf{R} \rightarrow S$ , onde  $\gamma(0) = p_1$ , temos que  $q_n = \gamma(s_n)$  e que  $s_n$  é uma seqüência limitada e seu limite tende a 0. Por fim a igualdade  $p_2 \hat{q}_n p_3 = \angle(-\gamma'_{w_n}(t_n), \gamma'(s_n))$  é válida para todo  $n \in \mathbf{N}$ , sendo assim*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} p_2 \hat{q}_n p_3 = \angle(-\gamma'_{w_0}(t_0), \gamma'(0)) = \hat{p}_1 \quad (2.15)$$

e assim prova-se o item ii.

Falta ainda provarmos o item iii. do nosso lema. Para isso vamos fazer uma aplicação inversa em um triângulo geodésica ideal que está contido no plano tangente de  $S$ , devido a isso  $\Delta_n$  será levado a um compacto  $\Omega_n = \exp_{p_2}^{-1}(\Delta_n) \subset T_{p_2}S$  que claramente é limitado por uma curva  $C_n$ , pois pegamos apenas triângulo geodésico ideal e não toda a superfície  $S$ . Vamos considerar que  $\theta_n = p_1 \hat{p}_2 q_n$  e tomar um ponto  $a_n \in C_n$ , tal que  $\|a_n\| = \max_{\omega \in C_n} \|\omega\|$ . Vale ressaltar que o compacto está contido em um setor circular  $\Theta$  que pertence ao espaço tangente de  $S$ , ou seja

$$\Omega_n \subset \Theta_n \in T_{p_2}S \quad (2.16)$$

e tem raio igual a  $\|a_n\|$  e ângulo  $\theta$ . Podemos ver que

$$\mu(\Omega_n) \leq \mu(\Theta_n) \quad (2.17)$$

e como sabemos calcular o lado direito da desigualdade dado por:

$$\mu(\Theta_n) = \int_{\Theta_n} K = \frac{\theta_n \|a_n\|}{2}, \quad (2.18)$$

portanto obtemos

$$\mu(\Omega_n) \leq \mu(\Theta_n) = \frac{\theta_n \|a_n\|}{2} \quad (2.19)$$

e como  $\mu(\Omega_n)$  é limitada superiormente por  $\mu(\Theta_n)$ , podemos aplicar o limite quando  $n$  vai para o infinito em  $\mu(\Theta_n)$  e saber o que acontece com  $\mu(\Theta_n)$ . Devido ao fato de  $\|a_n\|$  ser um sequência limitada como denotamos anteriormente, logo  $\lim_{n \rightarrow \infty} \|a_n\| = 0$ .

Agora para terminarmos nossa prova vamos fazer uma parametrização local  $X : U \subset \mathbf{R}^2 \rightarrow S$ , pois queremos obter  $\mu(\Delta_n)$ , tal que  $\Delta \subset X(U)$  e definindo  $c = \sup_{\Omega_n} \|X_u \wedge X_v\|$ , temos então que

$$\mu(\Delta_n) = \int_{\Omega_n} \|X_u \wedge X_v\| dudv \leq \sup_{\Omega_n} \|X_u \wedge X_v\| \mu(\Omega_n) = c \mu(\Omega_n), \quad (2.20)$$

$$\therefore \lim_{n \rightarrow \infty} \mu(\Delta_n) = 0. \quad (2.21)$$

o que prova o item iii. e por fim o lema.

Por fim vamos enunciar uma proposição que será bastante útil na demonstração do teorema que será enunciado a seguir, no entanto não a demonstraremos, mas ela pode ser vista em [26].

**Proposição 1 (Existência da função ângulo diferenciável)** *Seja  $S$  uma superfície regular orientável, ou seja, temos a existência de um campo normal não nulo  $N$ . Consideremos também  $\gamma : I \rightarrow V \subset S$  uma geodésica de  $S$  que é parametrizada em relação ao comprimento de arco e  $\zeta, \eta : \mathbf{R}^3$  campos diferenciáveis tangentes a superfície  $S$ , tais que para cada ponto  $p \in V$ , temos que  $\{\zeta(p), \eta(p), N(p)\}$ , onde  $N(p)$  é um campo normal a  $S$ , formam uma base ortonormal e com orientação positiva em  $T_p S$ . Existe então uma função diferenciável  $\theta : I \rightarrow \mathbf{R}^2$*

$$\gamma' = \cos \theta(s)\zeta(s) + \sin \theta(s)\eta(s) \quad \forall s \in I \quad (2.22)$$

e toda função  $\theta$  que satisfaça a equação acima, satisfaz também

$$\theta' = \langle \zeta, \eta' \rangle . \quad (2.23)$$

Finalmente agora temos em mãos ferramentas necessárias para enunciar e provar o teorema que dá nome a sessão. Esse teorema será bem útil para quando formos enunciar outro teorema fundamental da geometria diferencial e um dos de grande relevância para o campo da física dos isolantes topológicos que é o teorema de Gauss-Bonnet.

**Teorema 2.3.1 (Teorema Elegantissimum de Gauss)** *Para todo triângulo geodésico ideal  $\Delta$  de uma superfície regular orientável  $S$  é válido que*

$$\int_{\Delta} K = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 + \hat{p}_3 - \pi , \quad (2.24)$$

Onde  $K$  é a curvatura gaussiana na superfície  $S$ ,  $p_i$  são os vértices dos triângulos e  $\hat{p}_i$  seus respectivos ângulos em  $\Delta$ .

**Demonstração 3** *Vamos pegar um ponto  $q$  que esteja contido no interior do lado  $p_1p_3$  de  $\Delta$  e vamos denotar  $\Delta' \subset \Delta$  o triângulo geodésico cujo os vértices são  $q, p_2, p_3$ . Seja  $\gamma : I \subset \mathbf{R} \rightarrow S$  uma parametrização de  $\partial\Delta'$ , tal que tenhamos satisfeitas as condições:*

1.  $I = [a_0, a_1] \cup [a_1, a_2] \cup [a_2, a_3]$ ;
2.  $\gamma(a_0) = \gamma(a_3) = q$ ,  $\gamma(a_1) = p_2$  e  $\gamma(a_2) = p_3$ ;
3. cada geodésica  $\gamma_i = \gamma|_{(a_{i-1}, a_i)}$  é parametrizada por comprimento de arco;

Podemos escolher um sistemas de coordenadas conveniente e o mais adequado neste caso será usarmos as coordenadas polares em  $T_{p_1}$ . Ainda iremos supor que  $\Delta' \subset V \subset S$ , onde  $V$  é um aberto e neste aberto  $\Delta'$  está definido num campo tangente unitário e diferenciável  $\zeta$ , constituído pelos vetores velocidade geodésicos que partem do ponto  $p_1$ . Seja então  $N$  o campo normal em  $S$ , podemos observar a existência de um campo tangente unitário e diferenciável em  $V$  que pode ser escrito como

$$\eta = N \wedge \zeta \quad (2.25)$$

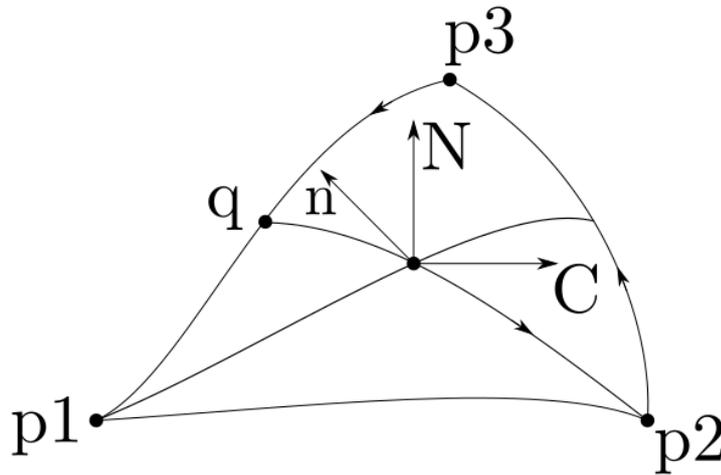


Figura 5 – Campos normais em um triângulo geodésico ideal  $\Delta'$ . Aqui temos representados  $n := \eta$  e  $C := \zeta$ .

devido a isso se pegarmos um ponto  $p \in V$ , temos que existe uma base para  $\mathbf{R}^3$  formada pelo conjunto  $\{\zeta(p), \eta(p), N(p)\}$ . Vale ainda dizer que  $N$  é escolhido tal que sua orientação é positiva.

Note que, nesse caso, uma vez que  $\zeta$  “aponta para dentro” de  $\Delta$  ao longo de  $\gamma_1$ , “aponta para fora” de  $\Delta$  ao longo de  $\gamma_2$  e é tangente a  $\gamma_3$  ao longo de  $\gamma_3$ , tem-se:

1.  $\langle \zeta, N \wedge \gamma'_1 \rangle > 0$  em  $(a_0, a_1)$ ;
2.  $\langle \zeta, N \wedge \gamma'_2 \rangle < 0$  em  $(a_1, a_2)$ ;
3.  $\langle \zeta, N \wedge \gamma'_3 \rangle = 0$  em  $(a_2, a_3)$ ;

Pela proposição 1, temos então que para cada  $i = 1, 2, 3$ , existe uma função  $\theta_i = \theta_i(s) \in [0, 2\pi)$ , tal que podemos escrever:

$$\gamma' = \cos \theta_i(s) \zeta(s) + \sin \theta_i(s) \eta(s) \quad \forall s \in (a_{i-1}, a_i). \quad (2.26)$$

Denotando que  $\lim_{s \rightarrow a_0} \theta(s) = \theta(a_0)$  e  $\hat{q}$  o ângulo de  $\Delta'$  no vértice  $q$ , observa-se que  $\cos \hat{q} = \cos \theta_1(a_0) = \langle \zeta(a_0), \gamma'_1(a_0) \rangle$  e também  $\sin \theta_1(a_0) = \langle \gamma'_1(a_0), \eta'(a_0) \rangle$ . Podemos escrever  $\eta'(a_0)$  como um produto externo e tomar proveito da propriedade *i*. listada à cima

$$\langle \gamma'_1(a_0), \eta_1(a_0) \rangle = \langle \gamma'_1(a_0), N'_1(a_0) \wedge \zeta(a_0) \rangle \quad (2.27)$$

$$= -\langle \zeta(a_0), N'_1(a_0) \wedge \gamma'_1(a_0) \rangle < 0 = -\sin \hat{q}, \quad (2.28)$$

então temos que

$$\cos \theta_1(a_0) = \cos \hat{q} = \cos(2\pi - \hat{q}) \quad (2.29)$$

$$\sin \theta_1(a_0) = -\sin \hat{q} = \sin(2\pi - \hat{q}) \quad (2.30)$$

$$\therefore \theta_1(a_0) = (2\pi - \hat{q}). \quad (2.31)$$

Semelhantemente podemos fazer isso para  $\theta_1(a_1), \theta_2(a_1), \theta_2(a_2), \theta_3(a_2)$  e  $\theta_3(a_3)$  e vamos obter os seguintes resultados

$\theta_1(a_0) = (2\pi - \hat{q})$	$\theta_1(a_1) = 2\pi - p_1\hat{p}_2q$
$\theta_2(a_1) = \pi - \hat{p}_2$	$\theta_2(a_2) = \hat{p}_3$
$\theta_3(a_2) = \pi$	$\theta_3(a_3) = \pi$

vamos escrever uma função soma dos ângulos de  $\Delta'$  em função de  $\theta_i$  e  $\theta_{i-1}$ , dada por

$$\Sigma_{\Delta'} = \sum_i [\theta_i(a_i) - \theta_i(a_{i-1})] \quad (2.32)$$

$$= [\theta_1(a_1) - \theta_1(a_0)] + [\theta_2(a_2) - \theta_2(a_1)] + [\theta_3(a_3) - \theta_3(a_2)] \quad (2.33)$$

$$= \hat{q} + \hat{p}_2 + \hat{p}_3 - \pi - p_1\hat{p}_2q \quad (2.34)$$

e do lema .2 temos que  $\lim_{q_n \rightarrow p_1} p_1\hat{p}_2q = 0$  e que  $\lim_{q_n \rightarrow p_1} \hat{q}_n = \hat{p}_1$ , e portanto

$$\lim_{q \rightarrow p_1} \Sigma_{\Delta'} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 + \hat{p}_3 - \pi . \quad (2.35)$$

Agora vamos tomar uma parametrização local de  $S$ ,  $X : UR^2 \rightarrow S$ , tal que o triângulo geodésico esteja contido em  $X(U)$  e ainda queremos que em decorrer desta parametrização  $N \circ X$  esteja coincidente com parte  $X_u \wedge X_v / \|X_u \wedge X_v\|$  em  $U$ . Denotando a aplicação inversa por  $\Omega = X^{-1}(U)$  e utilizando a seguinte relação

$$\langle \zeta_u, \eta_v \rangle - \langle \zeta_v, \eta_u \rangle = (N \circ X) \|X_u \wedge X_v\| , \quad (2.36)$$

temos que

$$\int_{\Delta'} K = \int_{\Omega} (N \circ X) \|X_u \wedge X_v\| dudv = \int_{\Omega} (\langle \zeta_u, \eta_v \rangle - \langle \zeta_v, \eta_u \rangle) dudv . \quad (2.37)$$

Uma vez que consideramos  $\eta_{uv} = \eta_{vu} \implies \langle \zeta_u, \eta_v \rangle - \langle \zeta_v, \eta_u \rangle = \langle \zeta, \eta_v \rangle_u - \langle \zeta, \eta_u \rangle_v$ , portanto nossa integral toma a seguinte forma de

$$\int_{\Delta'} K = \int_{\Omega} \langle \zeta, \eta_v \rangle_u - \langle \zeta, \eta_u \rangle_v dudv . \quad (2.38)$$

Antes de prosseguir temos que observar que a aplicação  $s \mapsto X^{-1}(\gamma(s)) = (u(s), v(s))$ , com  $s \in I$ , é uma parametrização para  $\partial\Omega$ . Podemos reescrever então  $\zeta(s) = \zeta(u(s), v(s))$  e  $\eta(u(s), v(s))$ . Em decorrer disto a parte  $\langle \zeta, \eta' \rangle$  pode ser escrita como  $\langle \zeta, ((s), v(s))' \rangle = \langle \zeta, u'\eta_v + v'\eta_u \rangle = u'\langle \zeta, \eta_v \rangle + v'\langle \zeta, \eta_u \rangle$ . Agora, a partir desse resultado, iremos o teorema de Green (que pode ser encontrado em livros de cálculo) na equação 2.38 e assim obtendo

$$\int_{\Omega} \langle \zeta, \eta_v \rangle_u - \langle \zeta, \eta_u \rangle_v dudv = \int_I u' \langle \zeta, \eta_v \rangle + v' \langle \zeta, \eta_u \rangle ds = \int_I \langle \zeta, \eta' \rangle ds \quad (2.39)$$

e utilizado a proposição 1 encontramos a seguinte expressão

$$\int_I \langle \zeta, \eta' \rangle ds = \sum_{i=1}^3 \int_{a_{i-1}}^{a_i} \theta'_i ds = \sum_{i=1}^3 [\theta(a_{i-1}) - \theta(a_i)] = \Sigma_{\Delta'} \quad (2.40)$$

$$\therefore \int_{\Delta'} K = \Sigma_{\Delta'} . \quad (2.41)$$

Seja  $\Delta'' \subset \Delta$  um triângulo geodésico de vértices  $p_1, p_2$  e  $q$ , é evidente que  $\int_{\Delta} K = \int_{\Delta'} K + \int_{\Delta''} K$ . Porém usando o lema .2, a medida que  $q$  a  $p_1$ , temos que a área de  $\Delta''$  converge à zero. Sendo assim

$$\lim_{q \rightarrow p_1} \left\{ \int_{\Delta'} K + \int_{\Delta''} K \right\} = \int_{\Delta} K + 0 \quad (2.42)$$

ou ainda

$$\lim_{q \rightarrow p_1} \int_{\Delta'} K = \lim_{q \rightarrow p_1} \Sigma_{\Delta'} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 + \hat{p}_3 - \pi \quad (2.43)$$

$$\therefore \int_{\Delta} K = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 + \hat{p}_3 - \pi . \quad (2.44)$$

E assim provamos esse belíssimo teorema.

## 2.4 Teorema Egregium de Gauss

**Teorema 2.4.1** A curvatura gaussiana é invariante por isometrias locais

**Demonstração 4** Seja  $S$  uma superfície regular e um ponto  $p \in S$ . Para todo  $n \in \mathbb{N}$ , vamos tomar  $r_n > 0$ , tal que,  $B_{r_n}(p)$  contenha  $\Delta_n$ , onde  $p \in \text{int}(\Delta_n)$ . Ainda vamos supor que a sequência  $(r_n)_{n \in \mathbb{N}}$  seja decrescente e convirja para 0. Seja  $\Sigma_n$  a soma dos ângulos de  $\Delta_n$ , do teorema *Elegantissimum* de Gauss temos

$$\int_{\Delta_n} K = \Sigma_n - \pi \quad (2.45)$$

e a partir do teorema do valor médio obtemos

$$\int_{\Delta_n} K = K(p_n) \mu(\Delta_n) . \quad (2.46)$$

Dado que  $\{p\} = \bigcap_{n=1}^{\infty} \Delta_n$  decorre disto que  $p_n \rightarrow p$ . E podemos encontrar o valor de  $K(p)$  igualando as integrais e tomando o limite quando  $n \rightarrow \infty$

$$K(p) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\Sigma_n - \pi}{\mu(\Delta_n)} . \quad (2.47)$$

Com isso concluí-se que a curvatura é uma propriedade intrínseca de uma superfície regular e a partir desse resultado podemos analisar dois conceitos clássicos de curvatura:

$$H = \frac{k_1 + k_2}{2} . \quad \text{Curvatura média} \quad (2.48)$$

$$K = k_1 \cdot k_2 . \quad \text{Curvatura gaussiana} \quad (2.49)$$

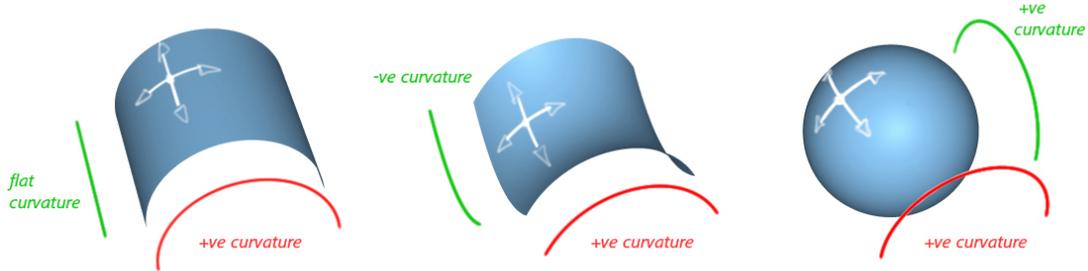


Figura 6 – Figura que mostra algumas superfícies e suas respectivas curvaturas principais, sendo que a única superfície que possui uma curvatura negativa é a sela [5]

## 2.5 Teorema de Gauss-Bonnet

**Teorema 2.5.1** *Seja  $S$  uma superfície regular compacta. Então*

$$\int_S K = 2\pi \chi(S) \quad (2.50)$$

**Demonstração 5** *Vamos considerar uma triangulação de  $S$  por triângulos geodésicos ideais  $\delta = \{\Delta_1, \dots, \Delta_F\}$  e expressando  $\sum_i \theta_{ij}$  a soma dos ângulos de  $\Delta_j$ , onde  $j = 1, \dots, F$ . Para cada vértice  $p$  de  $\delta$  a soma dos ângulos é igual a  $2\pi$ . Decorre disto que  $\sum_i \theta_{ij} = 2\pi V$ , onde  $V$  é o número de vértices. Podemos observar que  $S = \cup \Delta_j$ , segue-se então pelo teorema Elegantissimum de Gauss temos*

$$\int_S K = \sum_j \int_{\Delta_j} K = \sum_j \left( \sum_i \theta_{ij} - \pi \right) = \sum_j \sum_i \theta_{ij} - \pi F = 2\pi V - F\pi, \quad (2.51)$$

*onde  $F$  é o número de faces. Cada triângulo possui 3 lados  $L$  e cada lado é comum a 2 triângulos. Logo obtemos uma relação entre as faces e os lados da forma  $2L = 3F$  e substituindo na equação acima chegamos ao seguinte resultado:*

$$\int_S K = 2\pi V - 2\pi L + 2\pi F = 2\pi \chi(S) \quad , \text{com } \chi(S) = V - L - F . \quad (2.52)$$

A figura 7 nos ajuda a entender intuitivamente o conceito do teorema de Gauss-Bonnet. Basta sabermos calcular a integral da curvatura Gaussiana em uma superfície  $M$ , à qual este cálculo não seja tão complicado (por exemplo uma esfera), que independentemente da forma das inúmeras superfícies que existem, o resultado será o mesmo desde que estas outras superfícies

sejam homeomorfas a  $M$ . Adiante iremos introduzir o conceito de *genus* e a partir desta quantidade, podemos com praticidade saber se as superfícies serão equivalentes a  $M$ .

$$\int_{\mathcal{M}} K dA = 2\pi \chi(\mathcal{M})$$

$$\int K(\text{dolphin}) = \int K(\text{cow}) = \int K(\text{ball}) = 4\pi$$


Figura 7 – Representação do teorema de Gaus-Bonnet em superfícies fechadas de genus  $g = 0$ .

Podemos ainda relacionar o teorema de Gauss-Bonnet com a topologia da superfície através do *genus*  $g$  que diz simplesmente o número de furos (ou buracos) que uma dada variedade topológica possui.

**Teorema 2.5.2** *Um mapa de genus  $g$  possui característica de Euler  $\chi(M)$ :*

$$\chi(M) = V - E + F = 2g - 2 \quad (2.53)$$

Devido ao fato do *genus* ser um invariante topológico, consequentemente temos que a característica de Euler também é. Podemos observar isso ao olhar para um torus, onde este possui  $g = 1$ . Ao aplicar uma deformação continua no torus podemos transformá-lo em uma xícara ou até mesmo em um donuts como mostra a figura 1 e ambos possuem  $g = 1$ , logo o número de buracos foi preservado mediante uma transformação continua. Distó decorre que  $g$  é um invariante topológico. Na figura abaixo é possível ver outras superfícies com seus respectivos *genus* e que quando são deformadas topologicamente preservam o número de buracos.

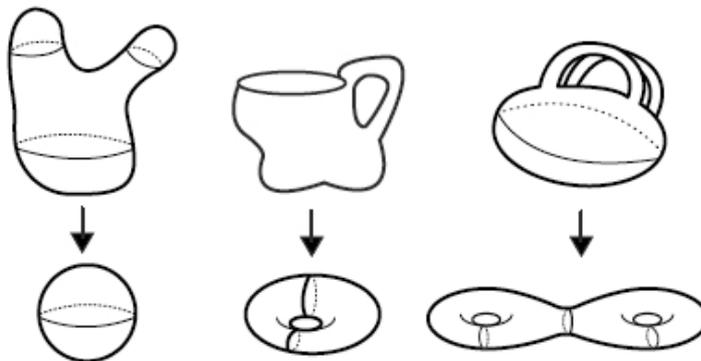


Figura 8 – Representação da invariância topológica do *genus*. [6]

## 3 Fundamentos de física do estado sólido

### 3.1 Teorema de Bloch

*“Quando comecei a pensar a respeito, percebi que o problema principal estava em explicar de que forma os elétrons conseguiram passar por todos os íons do metal... através de uma análise de Fourier elementar, descobri, para minha satisfação, que a onda diferia da onda plana para elétrons livres apenas por uma modulação periódica.”*

F. Bloch

Um cristal é um sólido ao qual podemos dizer que os seus constituintes estão organizados em um padrão bem definido ao longo das três direções do espaço. No entanto isso é um cristal idealizados, pois em suma um cristal possui certos tipos de impurezas e até mesmo em cristal com um alto nível de pureza existe uma probabilidade, que aumenta proporcionalmente com a temperatura, de encontrar íons mal posicionados e até mesmo vacâncias (ausência de íons ou átomos na estrutura de um sólido) que quebram a simetria do material. As imperfeições nos cristais são responsáveis por algumas propriedades em sólidos, como a resistividade e a condutividade.

Devido ao fato de que a rede cristalina é periódica podemos estudar diferentes tipos de materiais, pois cada tipo será composto de uma tipo de rede distinta. Isso possibilita a compressão de certas propriedades, dentre estas, temos as bandas proibidas de energia que são de extrema importância no estudo da física do estado sólido.

O objetivo desta sessão é estudar a dinâmica de um elétron e um rede cristalina sob a influência de um potencial periódico e para isso vamos considerar que o cristal é perfeito, ou seja, possui simetria em todas as direções. Para o caso do cristal real, temos que tomar em mãos a ferramenta de teoria perturbativas que pode ser visto na referência [27].

Primeiramente vamos considerar o Hamiltoniano em uma dimensão  $\hat{H} = \mathbf{p}^2/2m + V(x)$  e o potencial periódico da forma  $V(x + a) = V(x)$ , onde  $a$  é uma constante de periodicidade da rede. Sem mesmo conhecer os detalhes do potencial na célula unitária, somente com a simetria de translação já se pode obter uma gama de informações sobre o espectro de energia do sistema e suas autofunções.

Vamos agora introduzir o operador de simetria translacional dado por

$$\hat{T}(a) = e^{ia\hat{p}/\hbar}, \quad (3.1)$$

tal que este ao aplicado em uma função  $\psi(x)$  (que no nosso caso é a função de onda), faz com ela seja deslocada para esquerda ou para direita de modo que  $\hat{T}(a)\psi(x) = \psi(x + a)$ . A periodicidade do potencial implica que  $[\hat{T}, \hat{H}] = 0$ , portanto temos que os autovalores do operador de translação e do Hamiltoniano aplicados a função de onda  $\psi(x)$  são os mesmos, ou seja,  $\hat{T}\psi(x) = \lambda\psi(x)$ . A função de onda para elétrons em um potencial periódico é dada por  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$

e para sistemas infinitos ( $-\infty < x < +\infty$ ) a função de onda diverge para valores extremos de  $x$ . Para solucionar esta divergência vamos escrever  $\lambda = e^{ika}$ , onde  $k$  é o número de onda de Bloch e admite valores dentro do conjunto dos reais [28]. Na zona de Brillouin queremos que  $k$  esteja restringido a um intervalo de  $2\pi/a$  e de maneira costumeira vamos dividir o intervalo a seguinte forma  $I = (-\pi/a, \pi/a]$ .

Para cada valor de  $k$ , as autofunções e as autoenergias podem ser obtidos ao resolver a equação de Schrodinger sobre a célula unitária com a condição do teorema de Bloch:  $\psi(x+a) = e^{ika}\psi(x)$ . Podemos resolver o problema de autovalores num intervalo finito  $0 < x < a$ , assim as autofunções e as autoenergias formam um conjunto discreto  $\{\epsilon_n(k), \psi_{nk}(x), n = 0, 1, 2, \dots\}$ . Devido que  $k$  varia continuamente sobre a zona de Brillouin, as autoenergias descrevem um conjunto de bandas, denominadas de bandas de Bloch.

Agora queremos generalizar o teorema de Bloch para três dimensões. Para isto devemos descrever os vetores da zona de Brillouin que são chamados de *vetores da rede recíproca*:

$$\mathbf{G}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \quad \mathbf{G}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}, \quad \mathbf{G}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2} \quad (3.2)$$

disto podemos escrever então o vetor de onda de Bloch em três dimensões como  $\mathbf{k} = \alpha_1 \mathbf{G}_1 + \alpha_2 \mathbf{G}_2 + \alpha_3 \mathbf{G}_3$ .

Em três dimensões o potencial periódico da rede pode ser escrito como  $V(\mathbf{r} + \mathbf{a}_j) = V(\mathbf{r})$ , onde  $j = 1, 2, 3$ . Também podemos reescrever o operador de translação da forma  $\hat{T}_j = e^{i\mathbf{a}_j \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar}$ . Aplicando o operador de translação na função de onda  $\psi(\mathbf{r})$  obtém-se que os autovalores de energia são da forma  $\lambda_j = e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_j}$ . Portanto o teorema de Bloch diz que a função de onda dos elétrons em uma rede cristalina deverá conter a mesma periodicidade do potencial da própria rede, que podemos expressar como uma onda plana modulada pelo potencial periódico da rede cristalina

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_j} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3.3)$$

onde  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  é uma função periódica da rede.

Também podemos fazer uma demonstração utilizando teoria de grupos ou até mesmo a partir da forma integral da função de onda [29, 16].

## 3.2 Rede Recíproca

Um Cristal é, tecnicamente, uma estrutura que possui alto ordenamento microscópico de seus constituintes (átomos, moléculas, íons  $\dots$ ) que se repete nas três dimensões. Os arranjos dos átomos em um sólido cristalino, podem ser descritos usando pontos de uma rede de linhas que se estende nas três dimensões. Essa rede é denominada rede cristalina. Por “ordenamento” queremos dizer que existe uma periodicidade dos constituintes, de forma que qualquer ponto da rede é equivalente ao primeiro.

Existe um número infinito de configurações de uma rede cristalina em duas dimensões, pois não há restrições sobre o comprimento dos vetores ou sobre os ângulos que estes podem fazer entre eles. Para obter um número finito de configurações de uma rede cristalina deve-se impor certas restrições aos vetores, por exemplo, se desejássemos construir uma rede que seja invariante por rotação. Pelo fato de existir mais de um tipo de rede cristalina, defini-se então rede de Bravais cada tipo distinto de rede cristalina.

Consideremos uma rede de Bravais qualquer com a posição do centro do  $i$ -ésimo átomo da base da rede cristalina sendo escrita pelo conjunto  $\{\mathbf{r}_i\}$  dos pontos, tais que

$$\mathbf{r}_i = x_i \mathbf{a} + y_i \mathbf{b} + z_i \mathbf{c}, \quad (3.4)$$

onde  $x_i, y_i$  e  $z_i \in \mathbb{Z}$  e  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  e  $\mathbf{c}$  são vetores coplanares definidos da posição do centro do átomo em relação a um ponto na rede. Para cada  $\mathbf{r}_i$  podemos associar uma operação de simetria e translação que mantém a rede de Bravais invariante. Então se para cada  $\mathbf{r}_i$  associarmos uma operação, podemos ver uma certa periodicidade na rede, logo o conjunto  $\{\mathbf{r}_i\}$  define uma certa periodicidade da rede de Bravais. Agora imaginemos uma onda plana do tipo  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ , é fácil ver que esta onda está associada a uma determinada periodicidade, pois podemos escrever uma exponencial complexa em termos de senos e cossenos, que são funções periódicas. A periodicidade dessa onda plana está inerente ao comprimento de onda, pois  $\mathbf{k} = 2\pi\lambda$ . No entanto podemos ser deixados a levar que existe uma periodicidade para qualquer valor de  $\mathbf{k}$ , porém só existe para certos valores discretos  $\mathbf{k}$ .

Uma rede cristalina permanece invariante por translação da forma  $\mathbf{T} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$  e grandezas como a concentração de cargas, densidade de elétrons, densidade de massa e densidade dos momentos magnéticos são invariantes sob  $\mathbf{T}$ . Muitas das propriedades de um cristal podem ser relacionadas com a série de Fourier da densidade numérica de elétrons  $n(\mathbf{r})$ , pois ela é uma função periódica  $n(\mathbf{T} + \mathbf{r}) = n(\mathbf{r})$ . Podemos escrever a série de Fourier em uma dimensão para  $n(\mathbf{r})$  tal que

$$n(x) = n_0 + \sum_{j>0}^{\infty} \left[ A_j \cos\left(\frac{2\pi x}{a} j\right) + B_j \sin\left(\frac{2\pi x}{a} j\right) \right] \quad (3.5)$$

Onde  $A_j$  e  $B_j$  são constantes  $\in \mathbb{R}$ . Podemos simplificar a equação acima por

$$n(x) = \sum_{j>0}^{\infty} C_j e^{i\phi} \quad (3.6)$$

Onde  $\phi = \frac{2\pi x}{a} j$  e  $C_j \in \mathbb{C}$ , pois assim podemos garantir que  $n(x)$  seja uma função  $\in \mathbb{R}$ . Para mostrar isso partiremos de que tanto para valores de  $C_j^*$  com  $j < 0$  quanto para  $C_j$  com  $j > 0$  é necessário que os valores da somas sejam iguais, ou seja, isto vale se, somente se

$$C_{-j}^* = C_j \quad (3.7)$$

Fazendo  $n^*(x) + n(x)$  temos que

$$\sum_{-j}^{\infty} C_{-j}^* e^{i\phi} + \sum_j^{\infty} C_j e^{i\phi} \quad (3.8)$$

$$\sum_{-j}^{\infty} \sum_j^{\infty} C_{-j}^* (\cos \phi - i \sin \phi) + C_j (\cos \phi + i \sin \phi) \quad (3.9)$$

Que podemos expandir em funções trigonométricas

$$\sum_{j,-j}^{\infty} \left[ (C_j + C_{-j}^*) \cos \phi + (C_j - C_{-j}^*) i \sin \phi \right] \quad (3.10)$$

E pela equação 3.7 temos que a equação 3.10 se torna

$$2 \operatorname{Re} e\{C_j\} \cos \phi + 2 \operatorname{Im} m\{C_j\} \sin \phi \quad (3.11)$$

Podemos estender  $n(x)$  para o  $\mathbb{R}^3$  de forma bem similar, basta definirmos um conjunto  $\{\mathbf{G}\} \subset \mathbb{R}^3$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (3.12)$$

Onde  $\mathbf{G}$  é um conjunto de vetores que são invariantes sob as operações de translações  $\mathbf{T}$ , esse conjunto é denominado vetor da rede recíproca e pode ser escrito como

$$\mathbf{G} = n_1 \mathbf{G}_1 + n_2 \mathbf{G}_2 + n_3 \mathbf{G}_3 \quad (3.13)$$

Onde  $h, k, l \in \mathbb{Z}$  e  $\mathbf{A}, \mathbf{B}$  e  $\mathbf{C}$  são vetores que definem os eixos da rede recíproca.

### 3.3 Movimento dos elétrons na presença de campos magnéticos

O momento de um elétron livre é dado pela relação de De Broglie  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ , onde  $\mathbf{k}$  é o vetor de onda. Na presença de um campo  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$  o elétron irá sentir uma força de Lorenz, e como a carga do elétron é  $-e$  temos:

$$\mathbf{F}_\ell = -e \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right). \quad (3.14)$$

Comparando com a segunda lei de Newton e utilizando a relação de De Broglie obtêm-se que

$$\mathbf{F} = m \dot{\mathbf{v}} = \hbar \dot{\mathbf{k}}, \quad (3.15)$$

e por fim vamos igualar as equações 3.14 e 3.15, onde encontramos a seguinte expressão

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right). \quad (3.16)$$

Ao resolvermos a equação de Schrödinger em 3 dimensões para um elétron livre encontramos como solução  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ , onde as componentes do vetor de onda  $\mathbf{k}$  devem ser da forma  $k_x = k_y = k_z = 2n\pi/L$ , sendo que  $n \in \mathbf{Z}$  e desta forma as componentes de  $\mathbf{k}$  satisfazem as condições de contorno. Podemos substituir a solução que obtemos da equação de Schrödinger na equação de autovalores e consequentemente encontrar os valores de energia acessíveis do sistema que podem ser escritos por  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ . A energia de Fermi  $\varepsilon_F$  é definida como sendo a energia do nível mais alto ocupado no estado fundamental de um sistema contendo  $N$  elétrons, onde o número total de elétrons deve se levar em conta que estes podem ter o spin *up* ou *down*, então  $N = 2n_F$ . No estado fundamental deste sistema, podemos representar os orbitais ocupados pelos elétrons, como pontos no interior de uma esfera no espaço recíproco e a energia contida na superfície dessa esfera é a própria energia de Fermi. Os vetores de onda com respeito à esta superfície possuem módulo  $k_F$ , tal que ao substituir no valor da energia obtido a partir da equação de autovalores podemos obter a energia de Fermi  $\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ . O vetor de onda de onda pode ser escrito com respeito a  $k_x, k_y, k_z$  da seguinte forma  $\mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$  e na geometria analítica temos que o módulo de  $\mathbf{k}$  será a raio de uma esfera. Portanto a esfera de raio  $k_F$  no espaço recíproco é denominada esfera de Fermi.

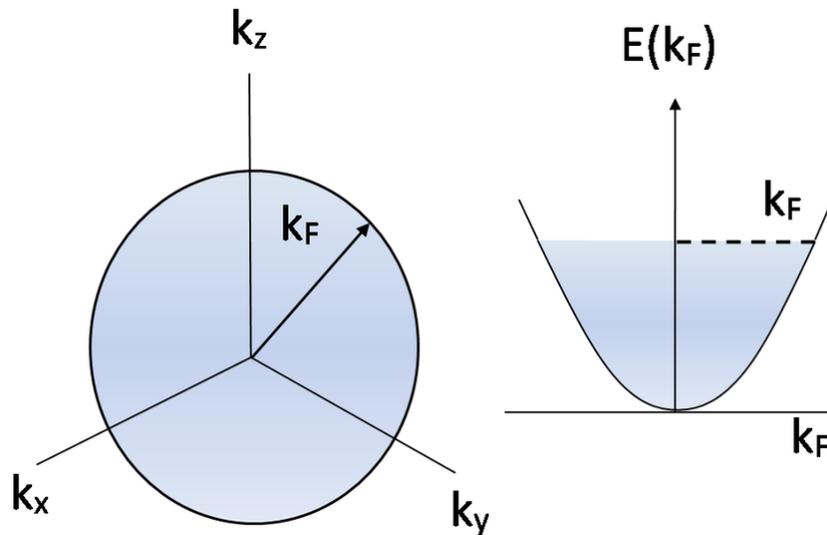


Figura 9 – Figura mostrando a relação entre a esfera de fermi e o *plot*  $\varepsilon(k_F) \times K_F$  [7].

Se não houver colisões dos portadores de carga com qualquer tipo de impurezas, fônons ou com alguma imperfeição na rede cristalina, teremos que a esfera de Fermi irá se mover com velocidade constante no espaço recíproco. Para encontrarmos o valor de  $\mathbf{k}$  iremos integrar a equação 3.16 e iremos considerar o caso em que  $\mathbf{E}$  é constante e que  $\mathbf{B} \neq 0$  num intervalo de tempo de  $0$  à  $t$ , donde

$$\dot{\mathbf{k}} \equiv \frac{d\mathbf{k}}{dt}. \quad (3.17)$$

Sendo assim,

$$\int_0^t \frac{d\mathbf{k}}{dt} dt = -\frac{e}{\hbar} \int_0^t \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) dt, \quad (3.18)$$

que resulta em

$$\delta\mathbf{k} = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E}t, \quad (3.19)$$

Onde definimos  $\delta\mathbf{k} = \mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)$ . Cada elétron representado na esfera de Fermi, sofre um deslocamento  $\delta\mathbf{k}$ , logo podemos induzir que a esfera de Fermi se desloca como um todo a uma velocidade constante. Podemos imaginar ainda que se a esfera de Fermi colidir com alguma impureza no meio, ela terá um retardo em sua velocidade que era constante e podemos definir esse retardo como  $\tau^{-1}$ , onde  $\tau$  é o tempo médio das colisões. Relacionando as equações 3.16 com a equação 3.19 e levando em consideração o termo de colisão com o meio obtemos

$$\mathbf{F} = \hbar \frac{d\delta\mathbf{k}}{dt} + \frac{\hbar}{\tau} \delta\mathbf{k} = \hbar \left( \frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \delta\mathbf{k}. \quad (3.20)$$

Notemos que o termo  $d/dt$  representa nada mais, nada menos que a aceleração dos elétrons na esfera de Fermi.

Para o caso em que  $\mathbf{B} \neq 0$  e uniforme temos que  $m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k} = \hbar\delta\mathbf{k}$ . Logo, se derivarmos encontramos  $F$ , então podemos associá-las a equação 3.20 de modo que obtemos

$$\mathbf{F} = \left( \frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) m\mathbf{v} = \left( \frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \hbar\delta\mathbf{k} \quad (3.21)$$

e igualando o primeiro termo da equação acima a força de Lorenzt  $\mathbf{F}_\ell$  chegamos a

$$\left( \frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) m\mathbf{v} = -e \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right). \quad (3.22)$$

Como  $\mathbf{B} \neq 0$  e é uniforme, vamos definir e fixar  $\mathbf{B}$  numa direção qualquer, por exemplo,  $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}} = B_z$ . Sabemos que  $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$  e que  $\mathbf{B}$  deve ser ortogonal a  $\mathbf{v}$ , então definindo  $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{x}}$  e  $\mathbf{v} = v\hat{\mathbf{y}}$ , a partir da equação 3.22 obtemos

$$\left( \frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) m\mathbf{v} = -e \left( E\hat{\mathbf{x}} + \frac{1}{c} Bv_y (\hat{\mathbf{y}} \times \hat{\mathbf{z}}) \right) = -e \left( E_x + \frac{1}{c} Bv_y \right). \quad (3.23)$$

Como os elétrons sentem o campo elétrico e começam a se mover na direção dele, na equação acima, no lado esquerdo da primeira igualdade teremos que  $\mathbf{v}$  terá a mesma direção de  $\mathbf{E}$  que resulta em

$$\left( \frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) mv_x = -e \left( E_x + \frac{1}{c} Bv_y \right). \quad (3.24)$$

Para o caso em que temos  $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{y}}$  e  $\mathbf{v} = v\hat{\mathbf{x}}$  obtemos

$$\left( \frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) mv_y = -e \left( E_y - \frac{1}{c} Bv_x \right). \quad (3.25)$$

Para o caso que nos restou temos  $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{z}}$ , mas  $\mathbf{E}$  deve ser perpendicular a  $\mathbf{B}$ , no entanto já definimos uma direção para  $\mathbf{B}$ . No entanto para que seja possível que os elétrons adquiram uma velocidade na direção do eixo  $z$  o campo magnético deve se anular na direção  $z$ . Por fim podemos escrever

$$\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)mv_z = -eE_z. \quad (3.26)$$

Nosso objetivo agora é encontrar os valores de  $v_x$ ,  $v_y$  e de  $v_z$ . Para isso começaremos supondo que  $\mathbf{E}$  é constante, pois com essa suposição num dado regime estacionário as derivadas em relação ao tempo irão se anular. Para  $v_x$  a expressão 3.24 resulta já supondo que  $\mathbf{E}$  seja constante em

$$\frac{1}{\tau}mv_x = -eE_x - \frac{1}{c}Bv_y, \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \therefore v_x &= -\frac{e\tau E_x}{m} - \frac{eB}{mc}\tau v_y. \\ \therefore v_x &= -\frac{e\tau E_x}{m} - \omega_c\tau v_y. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Onde definimos que  $\omega_c = eB/mc$  é a frequência ciclotônica. Fazendo também para  $v_y$  e  $v_z$  obtemos

$$\therefore v_y = -\frac{e\tau E_y}{m} + \omega_c\tau v_x. \quad (3.29)$$

$$\therefore v_z = -\frac{e\tau}{m}E_z. \quad (3.30)$$

### 3.4 Efeito Hall

Agora que já falamos sobre o movimento de uma esfera de elétrons sobre influência de um campo externo, que no nosso caso era o campo magnético e elétrico, podemos falar sobre um outro campo o qual pode influenciar o movimento dos elétrons. Imaginemos um condutor, onde entre suas faces temos uma corrente  $\mathbf{J}$  fluindo numa dada direção  $\hat{\mathbf{x}}$ , se colocarmos esse condutor num campo  $\mathbf{B}$  irá surgir uma diferença de potencial entre as faces. Denomina-se esse fenômeno de efeito Hall. Como temos  $\mathbf{J} = J\hat{\mathbf{x}}$  teremos que os elétrons irão se mover na direção  $-\hat{\mathbf{x}}$ , pois é padronizado que a direção positiva da corrente se dá aos movimentos das cargas positivas. Ao aplicarmos um campo magnético perpendicular a corrente o elétrons estarão sujeitos a força de Lorentz

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_m &= -e\left(\frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}\right) = -e\frac{vB}{c}(-\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{z}}) \\ &= -e\frac{vB}{c}, \hat{\mathbf{y}} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Então temos uma Força  $\mathbf{F}_m$  na direção do eixo  $y$  negativo. Sendo assim, vemos que os elétrons se agrupam na extremidade inferior do condutor. Consideremos que no condutor esteja num campo  $E_x$  e num campo magnético transversal  $B_z$ . Se a corrente não poder fluir na direção  $y$ , podemos dizer que  $\delta v_y = 0$ . A partir das eq. 2.25 e 2.26, podemos obter

$$v_x = -\frac{e\tau E_x}{m} - \omega_c \tau v_y \implies v_x = -\frac{e\tau E_x}{m}, \quad (3.32)$$

$$v_y = -\frac{e\tau E_y}{m} + \omega_c \tau v_x \implies \frac{e\tau E_y}{m} = \omega_c \tau v_x \quad (3.33)$$

E relacionando os dois resultados temos

$$E_y = -\omega_c \tau E_x, \quad (3.34)$$

Que é o campo elétrico transversal ou campo Hall para que  $\delta v_y = 0$ .

O campo Hall é o campo desenvolvido entre as duas faces do condutor e ele está numa direção que podemos calcular através do produto vetorial  $\mathbf{J} \times \mathbf{B}$ . Se dividirmos o campo Hall por esse produto vetorial teremos um valor de proporcionalidade, o qual denomina-se coeficiente hall  $R_H$

$$R_H = \frac{E_y}{J_x B}. \quad (3.35)$$

Por outro lado podemos calcular o potencial que irá surgir entre as bordas do condutor. Sabemos que a diferença de potencial pode ser obtida pela equação

$$V(\mathbf{r}) = - \int_{\diamond}^{\mathbf{r}} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l}, \quad (3.36)$$

Onde  $\diamond$  é um ponto inicial de referência. Como sabemos o valor do campo elétrico a equação do potencial se torna

$$V(\mathbf{r}) = - \int_0^a E_y d\mathbf{l} = \omega_c \tau E_x \int_0^a d\mathbf{l} = \frac{aeB\tau}{mc} E_x. \quad (3.37)$$

Por causa das colisões que o gás de elétrons está sujeito com relação ao meio, a esfera deslocada será mantida num estado estacionário no campo  $\mathbf{E}$ . Então podemos encontrar a velocidade da esfera de Fermi num tempo  $\tau$  a partir da equação 3.19 e da relação de De Broglie.

$$m\mathbf{v} = \hbar \delta \mathbf{k} \implies \mathbf{v} = -\frac{e}{m} \mathbf{E} \tau. \quad (3.38)$$

Se o campo elétrico é constante e pelo fato de que existem  $n$  elétrons na esfera de Fermi de carga  $-e$ , como o fluxo de carga está distribuído de forma contínua podemos calcular a densidade de corrente  $\mathbf{J}$ , que é a corrente por unidade área perpendicular ao fluxo

$$\mathbf{J} \equiv \frac{d\mathbf{I}}{da_{\perp}}. \quad (3.39)$$

Se analisarmos um infinitésimo de área do gás de elétrons, iremos obter uma densidade  $\rho$  de carga fluindo da mesma. A densidade  $\rho$  é o número de elétrons por unidade de volume

$\rho = nq$ . Considerando um certo volume  $dr'$  e como a carga pode ser calculada por  $dQ = \rho dr'$ , podemos relacionar as expressões e achar o valor da corrente  $\mathbf{I}$

$$\mathbf{J} = \rho \mathbf{v} = nq\mathbf{v} = \frac{1}{m} ne^2 \tau \mathbf{E} = \sigma \mathbf{E}, \quad (3.40)$$

Onde o valor  $ne^2 \tau / m = \sigma$  é definido pela lei de Ohm  $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ , e tem por nome condutividade elétrica. Podemos ainda atribuir tensores e escrever de forma matricial a relação para  $\sigma$  e para o campo elétrico em termos da resistividade  $\rho$  que é obtido a partir de uma manipulação simples da equação 3.40. Em termos tensoriais temos que as relações citadas assumem a seguinte forma em duas dimensões

$$\begin{bmatrix} J_x \\ J_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} \quad (3.41)$$

E para o campo elétrico temos

$$\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_x \\ J_y \end{bmatrix} = \frac{1}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{xy}\sigma_{yx}} \begin{bmatrix} \sigma_{yy} & -\sigma_{xy} \\ -\sigma_{yx} & \sigma_{xx} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_x \\ J_y \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

e por simetria temos que  $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$  e  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ . É interessante procuramos entender os termos fora da diagonal principal, que é a condutância transversal

$$\sigma_{xy} = \frac{\langle J_y \rangle}{E_x} = e \frac{\langle v_y \rangle}{E_x}, \quad (3.43)$$

onde com  $\langle \rangle$  queremos nos referir ao valor médio. Por fim voltando a equação 3.35, obtemos

$$R_H = -\frac{e\tau B E_x}{mc} \frac{m}{ne^2 \tau B E_x} = -\frac{1}{nec}. \quad (3.44)$$

Esse resultado a primeira vista pode se apresentar simples, pois relaciona o coeficiente Hall apenas com a condutividade dos elétrons. No entanto se houver portadores de cargas, ou seja, buracos produzidos pela falta de elétrons em um semi condutor por exemplo, contribuindo para a condutividade podemos obter uma expressão com um maior grau de complicação.



## 4 Fundamentos do efeito Hall quântico

### 4.1 Aproximação adiabática

A evolução de estados em sistemas quânticos é descrita pela equação de Schrödinger. Para cada instante  $t$  existirá um conjunto completo de auto-estados. O teorema adiabático diz que um sistema que está num certo estado  $H(0)$ , após uma evolução lenta, o estado do sistema irá permanecer no mesmo autoestado a menos de um fator multiplicativo denominado fator dinâmico. Dentro da descrição da mecânica quântica de sistemas físicos podemos ter um espaço de Hilbert com dimensão finita ou infinita. Dentro desse espaço contém um conjunto de operadores lineares que agem sobre os autovetores também do espaço de Hilbert e podemos interpretar esses operadores como observáveis, ou seja, antes de um sistema que podem ser medidos. Em sistemas isolados esses operadores dependem de um certo conjunto de parâmetros  $\mathbf{R} = (R^1, R^2, \dots)$  e em particular, sistemas que evoluem com o tempo como os sistemas dinâmicos temos  $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$ . Para um sistema quântico, os parâmetros de  $\mathbf{R}$  selam os pontos suaves de uma variedade diferencial  $M$  e como os pontos do sistema evoluem com o tempo no plano dos parâmetros podemos descrever uma curva  $\mathbf{C} : [0, t] \rightarrow M$  onde  $\mathbf{R}(t) \in \mathbf{C}$ . A variedade  $M$  é denominada espaço de parâmetros de um sistema quântico e partir dela podemos tirar uma gama enorme de propriedades geométricas em  $\mathbf{R}^n$ , sendo que essas propriedades dependem do sistema de interesse <sup>[30]</sup>.

Seja a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha; t\rangle = H(t) |\alpha; t\rangle, \quad (4.1)$$

a solução desta equação diferencial pode ser escrita como

$$|\alpha; t\rangle = \sum_n c_n(t) \exp\{i\theta_n(t)\} |n; t\rangle, \quad (4.2)$$

onde  $\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'$ . Aqui vamos substituir 4.2 em 4.1 e depois usar o resultado da equação de autovalores  $H(t) |n; t\rangle = E_n |n; t\rangle$ . Sendo assim temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha; t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[ \sum_n c_n(t) \exp\{i\theta_n(t)\} |n; t\rangle \right] \quad (4.3)$$

$$= i\hbar \left[ \sum_n \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} \exp\{i\theta_n(t)\} |n; t\rangle + c_n \frac{\partial |n; t\rangle}{\partial t} \exp\{i\theta_n(t)\} \right] \quad (4.4)$$

$$= \sum_n \exp\{i\theta_n(t)\} \left[ \dot{c}_n(t) |n; t\rangle + c_n(t) \frac{\partial |n; t\rangle}{\partial t} \right] = 0. \quad (4.5)$$

Tomando o produto interno com  $\langle m; t |$  e utilizando a ortonormalidade entre os autoestados para dado um tempo  $t$ , ou seja,  $\langle m; t | n; t \rangle = \delta_{mn}$ , podemos encontrar uma equação para  $c_n(t)$ ,

$$i\hbar \langle m; t | \frac{\partial}{\partial t} | \alpha; t \rangle = \sum_n \exp\{i\theta_n(t)\} \left[ \langle m; t | \dot{c}_n(t) | n; t \rangle + \langle m; t | c_n(t) \frac{\partial | n; t \rangle}{\partial t} \right] \quad (4.6)$$

$$\therefore \dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n(t) \exp\{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))\} \langle m; t | \left[ \frac{\partial | n; t \rangle}{\partial t} \right]. \quad (4.7)$$

Se o Hamiltoniano não dependesse do tempo, teríamos que os autoestados seriam estacionários <sup>[31]</sup>. Queremos lidar para o caso mais geral possível, então retornando a equação de autovalores, vamos derivar dos dois lados da equação em relação ao tempo e tomar novamente o produto interno  $\langle m; t |$  e assumir os valores de  $m \neq n$

$$\frac{\partial}{\partial t} (H(t) | n; t \rangle) = \frac{\partial}{\partial t} (E_n | n; t \rangle) \quad (4.8)$$

$$\langle m; t | \left[ \frac{\partial H(t)}{\partial t} | n; t \rangle + H(t) \frac{\partial | n; t \rangle}{\partial t} \right] = \langle m; t | \left[ \frac{\partial E_n(t)}{\partial t} | n; t \rangle + E_n \frac{\partial | n; t \rangle}{\partial t} \right], \quad (4.9)$$

$$\langle m; t | \dot{H}(t) | n; t \rangle = (E_n(t) - E_m(t)) \langle m; t | \left[ \frac{\partial}{\partial t} | n; t \rangle \right]. \quad (4.10)$$

Agora podemos isolar o produto interno do lado direito da equação acima que possui um termo com a derivada do autoestado  $n$ ,

$$\langle m; t | \left[ \frac{\partial}{\partial t} | n; t \rangle \right] = \frac{\langle m; t | \dot{H}(t) | n; t \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}. \quad (4.11)$$

De uma forma mais geral, vamos separar a equação 4.7 em dois somatórios, um para  $n = m$  e outro para  $n \neq m$

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_{n=m} c_n(t) e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))} \langle m; t | \left[ \frac{\partial | n; t \rangle}{\partial t} \right] - \sum_{n \neq m} c_n(t) e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))} \langle m; t | \left[ \frac{\partial | n; t \rangle}{\partial t} \right] \quad (4.12)$$

no somatório em que temos  $n = m$  a soma dentro da exponencial é igual a zero e consequentemente temos que o somatório se resume a apenas um termo  $c_m$  multiplicado pelo produto externo. Por outro lado quando temos que  $n \neq m$ , o somatório não se resume a apenas um termo e usaremos o resultado encontrado na equação 4.11, que nos permite escrever a seguinte equação que é a solução geral de dependência temporal. Entretanto dizer que  $n \neq m$  não é suficiente, dado que pode existir casos onde os estados são degenerados, ou seja,  $E_n = E_m$ , mas neste trabalho só consideramos os casos onde não temos degenerescência.

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle m; t | \left[ \frac{\partial | m; t \rangle}{\partial t} \right] - \sum_{n \neq m} c_n(t) e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))} \frac{\langle m; t | \dot{H}(t) | n; t \rangle}{E_n(t) - E_m(t)} \quad (4.13)$$

Observando o segundo termo da equação acima podemos observar que a medida que o sistema evolui no tempo os estados  $n \neq m$  irão se misturar devido ao fato de que o Hamiltoniano depende do tempo [32]. Na aproximação adiabática iremos assumir que a escala de tempo para uma transformação no Hamiltoniano deve ser muito maior que o período do fato de fase do estado, ou seja, a frequência de oscilação do sistema muda bem mais rápido do que o Hamiltoniano, disto temos

$$\frac{\langle m; t | \dot{H}(t) | n; t \rangle}{E_n(t) - E_m(t)} \equiv \frac{1}{\tau} \ll \langle m; t | \left[ \frac{\partial}{\partial t} | n; t \rangle \right] \sim \frac{E_m}{\hbar} \quad (4.14)$$

Sendo assim podemos resolver a equação diferencial 4.13 utilizando a aproximação adiabática que nos permitirá desprezar o segundo termo da mesma, tornando mais simples resolvê-la. Vamos ainda, tomando esta aproximação, substituir o termo acompanhado do produto interno pela energia sobre  $\hbar$  como mostramos na equação acima. Assim, temos

$$\dot{c}_m(t) \sim -c_m(t) \frac{E_m}{\hbar} \implies c_m(t) = c_m(0) \exp\left\{-\int_0^t E_m(t') dt'\right\} \quad (4.15)$$

$$= c_m(0) \exp\left\{i^2 \int_0^t \langle m; t' | \left[ \frac{\partial}{\partial t'} | m; t' \rangle \right] dt'\right\} \quad (4.16)$$

$$= c_m(0) e^{i\gamma_m(t)}. \quad (4.17)$$

Vale ressaltar que o integrando de  $\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle m; t' | \left[ \frac{\partial}{\partial t'} | m; t' \rangle \right] dt'$  é imaginário puro. Podemos observar isso ao derivar o produto interno de um estado que dependa do tempo. Como o produto interno retorna um número temos que sua derivada é zero, no entanto ao aplicar a regra do produto em derivadas podemos igualar os dois termos oriundos da regra do produto e obtemos que

$$\left( \langle n; t' | \left[ \frac{\partial}{\partial t'} | n; t' \rangle \right] \right)^* = - \langle n; t' | \left[ \frac{\partial}{\partial t'} | n; t' \rangle \right] \quad (4.18)$$

e consequentemente  $\gamma_n(t)$  é real.

Na maioria dos casos as equações diferenciais para os  $c_n$  não são dotadas de soluções exatas, sendo assim devemos procurar uma solução aproximada e para isso vamos utilizar a expansão perturbativa para  $c_n$  até ordem  $n$ ,

$$c_n(t) \sim c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \dots + c_n^{(n)}. \quad (4.19)$$

Entretanto, vamos pegar até a primeira ordem de aproximação  $c_n^{(0)}$ . Tomando em mãos ferramentas da teoria de perturbação dependente do tempo, iremos supor que inicialmente existe apenas um determinado estado  $j$  ocupado e usando o método de iteração queremos descobrir os valores aproximados de  $c_n^{(1)}, \dots, c_n^{(n)}$ . Para isso iremos abrir mão a priori de trabalhar com

os coeficientes  $c_n$  e vamos definir um operador de evolução temporal  $U(t, t_0)$ . Podemos fazer uma expansão aproximativa desse operador que conseguiremos relacionar com os  $c_n$ . Na representação de iteração temos

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = U_I(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle_I \quad (4.20)$$

e substituindo na equação de Schrödinger obtemos

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I(t, t_0) = V_I U_I(t, t_0) . \quad (4.21)$$

A condição de contorno dessa equação diferencial é que para quando  $t = t_0$  o operador de evolução temporal é igual a matriz identidade  $\mathbf{I}$ , sendo assim podemos integrar dos dois lados da equação acima em relação ao tempo e chegamos a

$$U_I(t, t_0) = U_I(t, t_0)|_{t=t_0} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt' \quad (4.22)$$

$$= \mathbf{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt' . \quad (4.23)$$

Supondo que em  $t = t_0$  o sistema esteja em um estado  $|j\rangle$  temos então que  $|\alpha, t_0; t_0\rangle_I = |j\rangle$  e para  $t \neq t_0$  temos  $|\alpha, t_0; t\rangle_I = U_I(t, t_0) |j\rangle$ . Podemos ainda expandir o ket  $|\rangle_I$  da representação de iteração usando uma base  $|n\rangle$ , portanto podemos comparar com o ket de autoestado para um tempo posterior ao tempo inicial

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle \implies U_I(t, t_0) |j\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (4.24)$$

$$\implies \langle n | U_I(t, t_0) |j\rangle = \sum_n \langle n | c_n(t) |n\rangle \quad (4.25)$$

$$\implies c_n(t) = \langle n | U_I(t, t_0) |j\rangle \quad (4.26)$$

$$\implies c_n(t) = \langle n | \mathbf{I} |j\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle n | V_I(t') |j\rangle U_I(t', t_0) dt' \quad (4.27)$$

$$\implies c_n = \delta_{nj} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle n | V_I(t') |j\rangle U_I(t', t_0) dt' \quad (4.28)$$

e comparando com a equação 4.19, podemos de imediato observar que  $c_n^{(0)} = \delta_{nj}$ . Em decorrer desse resultado, se um sistema começa num estado  $|n\rangle$  de  $H(0)$  ele continua no mesmo estado para um tempo posterior  $H(t)$ , a menos de uma fase. Para  $n = j$  o termo  $c_n^{(0)} = 1$  e fazendo  $m = n$  em 4.17 vamos substituir o resultado em 4.2, então

$$|\alpha^{(n)}; t\rangle = e^{i\gamma_n(t)} e^{i\theta_n(t)} |n; t\rangle . \quad (4.29)$$

Por outro lado ao considerarmos o caso em que  $H(t_0) \neq H(t)$ , temos que  $\gamma_n(t) = +E_n t/\hbar$  e  $\theta_n(t) = -E_n t/\hbar$ , então por fim obtemos que o estado permanece o mesmo

$$|\alpha^{(n)}; t\rangle = |n; t\rangle . \quad (4.30)$$

Entendemos então por aproximação adiabática o fato que quando o autoestado do Hamiltoniano evolui no tempo de forma lenta, ele irá retornar a autoestado inicial acrescido de uma fase.

## 4.2 A fase de Berry

Dado  $H(t) : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$  uma família de Hamiltonianas auto adjuntas suaves dependentes do  $t \in \mathbb{R}$ , que evolui adiabaticamente atravessando uma curva fechada  $C \subset \mathcal{P}(\mathcal{H})$ . Considerando uma Hamiltoniana periódica, ou seja,  $H(t) = H(t + 2\pi)$ , é notável vermos que  $H(t)$  é uma função com valores distribuídos no círculo de parametrização  $S^1 = (e^{it} : t \in [0, 2\pi])$ . Vamos supor que a dependência temporal do hamiltoniano seja representada na forma de um vetor do espaço de parâmetros  $\mathbf{R}(t)$  que é uma variedade  $M$ . A vantagem de se utilizar essa representação a partir dos vetores  $\mathbf{R}(t)$  é que além destes caracterizarem o hamiltoniano, eles evoluem no tempo. Com isso nosso ket de autoestado toma a seguinte forma  $|n; t\rangle = |n(\mathbf{R}(t))\rangle$ . Derivando ambos os lados da equação e usando derivação implícita obtemos que

$$\frac{\partial |n; t\rangle}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle \frac{d\mathbf{R}}{dt} \quad (4.31)$$

sendo que  $\nabla_{\mathbf{R}}$  surge pelo fato que estamos considerando que o hamiltoniano tenha mais de um parâmetro, logo

$$\langle n; t | \left[ \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle \right] = \langle n; t | [\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle] \frac{d\mathbf{R}}{dt} \quad (4.32)$$

Substituindo este resultado no valor de  $\gamma_n$  que foi definido através da equação 4.17 obtemos uma relação para a fase geométrica no espaço de parâmetros  $M$ . Ainda vamos considerar o fato de que os valores do hamiltoniano estão distribuídos sobre o círculo  $S^1$ , de tal modo que o vetor  $\mathbf{R}$  percorre uma curva fechada  $C$ . Logo das equações 4.17 e 4.32 obtemos que

$$\gamma_n(C) = i \int_0^{t'=t'_0+2\pi} \langle n; t | [\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle] \frac{d\mathbf{R}}{dt} dt \quad (4.33)$$

$$= i \int_{R(0)}^{R(2\pi)} \langle n; t | [\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle] d\mathbf{R} \quad (4.34)$$

$$= i \oint \langle n; t | [\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle] d\mathbf{R} . \quad (4.35)$$

Essa equação é uma integral de linha através de uma curva fechada e que tendenciosamente induz a aplicarmos o teorema de Stokes sobre ela. Vamos definir um potencial vetor de campo denominado conexão de Berry como  $\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle n; t | [\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle]$ . Um fato interessante é que a conexão de Berry é semelhante ao potencial vetor em eletromagnetismo, portanto admite uma transformação de calibre da forma  $\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \rightarrow \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}}\chi$  e ao aplicar uma transformação de calibre obtemos  $|n; t\rangle \rightarrow e^{i\chi(\mathbf{R})} |n; t\rangle$ . Disto podemos observar que a fase  $\gamma_n$  mudará conforme  $\chi(\mathbf{R}(t)) - \chi(\mathbf{R}(0))$  e como o sistema evolui ciclicamente ao longo de uma curva fechada  $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}(0)$  e a condição de valor único da função de onda requer  $\chi(\mathbf{R}(t)) - \chi(\mathbf{R}(0)) = 2m\pi$ , onde  $m \in \mathbb{Z}$ . Vamos substituir a conexão de Berry na equação 4.35 e aplicar o teorema de Stokes para três dimensões

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \iint_S (\nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R})) \cdot d\mathbf{a} \quad (4.36)$$

$$= \iint_S \mathbf{\Omega}^n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{a} = \Phi_n. \quad (4.37)$$

O termo  $\mathbf{\Omega}^n(\mathbf{R})$  é definido como tensor curvatura de Berry e suas componentes são dadas por

$$\mathbf{\Omega}_{\mu\nu}^n(\mathbf{R}) = \partial_\mu(\mathbf{A})_\nu - \partial_\nu(\mathbf{A})_\mu \quad (4.38)$$

$$= \partial_\mu [i \langle n; t | \nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle]_\nu - \partial_\nu [i \langle n; t | \nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle]_\mu \quad (4.39)$$

$$= i \{ \partial_\mu [\langle n; t | \partial_\nu |n; t\rangle] - \partial_\nu [\langle n; t | \partial_\mu |n; t\rangle] \} \quad (4.40)$$

$$= i \{ \langle \partial_\mu(n; t) | \partial_\nu(n; t) \rangle - \langle \partial_\nu(n; t) | \partial_\mu(n; t) \rangle \}. \quad (4.41)$$

Para o caso em uma dimensão a curvatura de Berry é zero, de fato isso tem que acontecer, pois em 1D o fluxo é zero.

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \int \psi_n(x, t) \frac{d}{dt} \psi_n(x, t) dx = i \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x, t)|^2 dx \quad (4.42)$$

$$= i \frac{d}{dt} 1 = 0. \quad (4.43)$$

Em mecânica quântica temos a seguinte relação de completeza

$$\sum_n |n; t\rangle \langle n; t| = \mathbb{I}. \quad (4.44)$$

Semelhante o que fizemos na sessão sobre aproximação adiabática, podemos deduzir uma identidade a partir da equação de autovalores. Seja a equação de autovalores dada por  $\mathbf{H}(\mathbf{R}) |n; t\rangle = E_n |n; t\rangle$ , vamos derivar ambos os lados em relação ao vetor  $\mathbf{R}$  obtemos a seguinte expressão

$$\nabla_{\mathbf{R}} (\mathbf{H}(\mathbf{R}) |n; t\rangle) = \nabla_{\mathbf{R}} (E_n |n; t\rangle) \quad (4.45)$$

$$\langle m; t | \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{H}(\mathbf{R}) |n; t\rangle = (E_n(t) - E_m(t)) \langle m; t | [\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle] \quad (4.46)$$

$$\implies \langle m; t | \nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle = \frac{\langle m; t | \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{H}(\mathbf{R}) |n; t\rangle}{(E_n - E_m)} \quad (4.47)$$

Por fim podemos chegar a uma expressão alternativa para a curvatura de Berry para valores de  $n \neq m$

$$\Omega^n = \text{Im} \sum_{n \neq m} \frac{\langle m; t | \nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) |n; t\rangle \times \langle m; t | \nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) |n; t\rangle}{(E_n - E_m)^2}. \quad (4.48)$$

### 4.3 Fase de Berry para um sistema de Spin's

Vamos considerar um elétron com spin 1/2 e que este possua apenas um grau de liberdade. A Hamiltoniana desse sistema pode ser descrita da seguinte forma

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} Z & X - iY \\ X + iY & -Z \end{pmatrix}. \quad (4.49)$$

Por outro lado, podemos escrever a Hamiltoniana como um produto escalar que resulta em  $H(\mathbf{R}) = \mathbf{R} \cdot \hat{\sigma}$ , onde  $\mathbf{R}$  é um parâmetro da forma  $\mathbf{R} = (h_1, h_2, h_3)$  e  $\hat{\sigma}$  é o vetor de Pauli dado por  $\hat{\sigma} = \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_z$ . Queremos calcular a fase de Berry para  $\mathbf{R} \neq 0$ , pois ao considerar valores nulos para o parâmetro em estudo estaríamos de fato supondo que o ponto  $O = (0, 0, 0)$ , que é a origem, evoluísse juntamente com o sistema e ganharia uma fase. Sendo assim para  $\mathbf{R} \neq 0$  temos as seguintes equações de valores próprios

$$\mathbf{R} \cdot \hat{\sigma} |+, \mathbf{R}\rangle = +\sqrt{R} |+, \mathbf{R}\rangle, \quad (4.50)$$

$$\mathbf{R} \cdot \hat{\sigma} |-, \mathbf{R}\rangle = -\sqrt{R} |-, \mathbf{R}\rangle, \quad (4.51)$$

Aqui temos que os autoestados é dado por  $|\pm, \mathbf{R}\rangle$ , pois o spin pode ser *up* ou *down*. Os autovalores de energia são  $E = \pm R$ , onde  $R$  é a distância da origem até um ponto  $p$  no espaço e para  $\pm R = 0$ , temos degenerescência e também a curvatura de Berry nesse caso diverge, pois  $(E_n - E_m) = 0$ .

A partir da equação 4.35, podemos calcular a fase de berry para esse sistema de spin. Para o *ket* referente ao spin *down*, temos que a curvatura de Berry será dada por uma integral fechada sobre um a curva  $C$  no espaço de parâmetros. Neste caso o potencial vetor é dado por  $\mathbf{A}(\mathbf{R}) = i \langle -, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} |-, \mathbf{R}\rangle$ , então a partir da definição da curvatura de Berry e novamente aplicando o teorema de Stokes, obtém-se

$$\gamma_- = \oint_C \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \int_S \Omega^-(\mathbf{R}) \cdot ds. \quad (4.52)$$

Por outro lado, a partir da equação 4.53, podemos reecreer a curvatura de Berry para o sistema de spin 1/2 da seguinte forma

$$\Omega^\pm(\mathbf{R}) = -\text{Im} \frac{\langle \pm | \nabla_{\mathbf{R}} H | \mp \rangle \times \langle \mp | \nabla_{\mathbf{R}} H | \pm \rangle}{4R^2}. \quad (4.53)$$

De imediato temos que  $\nabla_{\mathbf{R}} H = \hat{\sigma}$ . Considerando apenas a parte negativa como fizemos para a fase de Berry a expressão acima se torna

$$\Omega^-(\mathbf{R}) = -\text{Im} \frac{\langle - | \hat{\sigma} | + \rangle \times \langle + | \hat{\sigma} | - \rangle}{4R^2}. \quad (4.54)$$

Para calcular o valor de  $\Omega^-(\mathbf{R})$  iremos desenvolver os *braket's* em função das matrizes de Pauli. Isto irá facilitar as contas uma vez que podemos calcular cada elemento de matriz separadamente e depois somá-los. Em suma o que temos é

$$\langle - | \hat{\sigma} | + \rangle = \langle - | \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} | + \rangle \hat{i} + \langle - | \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} | + \rangle \hat{j} + \langle - | \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} | + \rangle \hat{k}, \quad (4.55)$$

$$\therefore \langle - | \hat{\sigma} | + \rangle = \begin{pmatrix} \langle - | \sigma_x | + \rangle \\ \langle - | \sigma_y | + \rangle \\ \langle - | \sigma_z | + \rangle \end{pmatrix}. \quad (4.56)$$

Considerandos os autoestados  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$  da maneira que se precede, poderemos encontrar de maneira simples os elementos de matrizes de  $\langle - | \hat{\sigma} | + \rangle$

$$|+, \mathbf{R}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-, \mathbf{R}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.57)$$

Lembrando que  $|\alpha\rangle^* = \langle \alpha| = (a_1 \dots a_i)$ , consequentemente

$$\langle - | \hat{\sigma}_x | + \rangle = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1; \quad (4.58)$$

$$\langle - | \hat{\sigma}_y | + \rangle = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i; \quad (4.59)$$

$$\langle - | \hat{\sigma}_z | + \rangle = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0; \quad (4.60)$$

$$\therefore \langle - | \hat{\sigma} | + \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.61)$$

$$\therefore \langle + | \hat{\sigma} | - \rangle^* = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.62)$$

Calculando então o produto vetorial em 4.54 é possível obter o seguinte resultado

$$\langle -|\hat{\sigma}|+\rangle \times \langle +|\hat{\sigma}|-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -2i \end{pmatrix} \quad (4.63)$$

Por fim ao substituir esse resultado em 4.54 encontramos

$$\Omega^-(\mathbf{R}) = -\frac{1}{4R^2} \text{Im} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -2i \end{pmatrix} \hat{z} \quad (4.64)$$

$$= \frac{\mathbf{R}}{|\mathbf{R}|} \frac{1}{2R^2}. \quad (4.65)$$

onde aqui consideramos  $\hat{z} = \mathbf{R}/|\mathbf{R}|$ . Portanto de forma geral podemos escrever a seguinte expressão para a curvatura de Berry para um sistema de spin:

$$\Omega^\pm(\mathbf{R}) = \mp \frac{\mathbf{R}}{|\mathbf{R}|} \frac{1}{2R^2}. \quad (4.66)$$

Se ao aplicarmos o gradiente na curvatura de Berry obtemos  $\nabla_{\mathbf{R}}\Omega = 2\pi\delta(\mathbf{R})$ . O surgimento de uma delta fornece uma propriedade interessante da superfície sobre a qual estamos integrando a curvatura de Berry, e esta é que podemos considerar a existência de um monopolo magnético pontual na origem do espaço de parâmetros em  $\mathbf{R} = 0$ . Podemos observar a partir da equação 4.52 que a fase de Berry  $\gamma_-$  do circuito fechado  $C$  no espaço de parâmetros é simplesmente o fluxo do campo do monopolo através da superfície  $S$  limitada pela curva  $C$ , ou seja,

$$\gamma_-(C) = \int_S \Omega^- \cdot ds = \frac{\Omega_c}{2}, \quad (4.67)$$

aqui  $\Omega_c$  é o ângulo sólido subtendido por  $C$ . Devido a isso podemos concluir que o estado do sistema adquire uma fase puramente geométrica em decorrer da evolução adiabática no tempo do sistema ao longo de uma curva fechada no espaço de parâmetros.

Podemos considerar o caso de um elétron num campo magnético cuja Hamiltoniana é dada por  $H = -\mu \cdot \mathbf{B}$ . Nesse caso o parâmetro  $\mathbf{R}$  será atribuído ao campo magnético, isto é,  $\mathbf{R} := \mathbf{B}$ . Isso implica que a curvatura de Berry será dada por

$$\Omega^\pm(\mathbf{B}) = \frac{\mathbf{B}}{2B^3} \quad (4.68)$$

e ainda

$$e^{i\gamma_\pm(C)} = e^{\pm i\Omega_c/2}. \quad (4.69)$$

Neste caso  $\Omega_c$  é o ângulo sólido relativo a degenerescência em  $\mathbf{B} = 0$ . Ao rotacionarmos  $\mathbf{B}$  lentamente em um fator de  $2\pi$  em torno de um eixo ortogonal ao plano em que se encontra  $\mu$  e  $\mathbf{B}$ , teremos que  $\Omega_c = 2\pi$  e a consequência dessa evolução adiabática será que o autoestado

$|n; t_0\rangle$  irá retornar ao estado inicial na forma  $-|n; t_{2\pi}\rangle$ , onde o  $(-1)$  se dá ao fato de uma fase geométrica acrescida pela evolução adiabática.

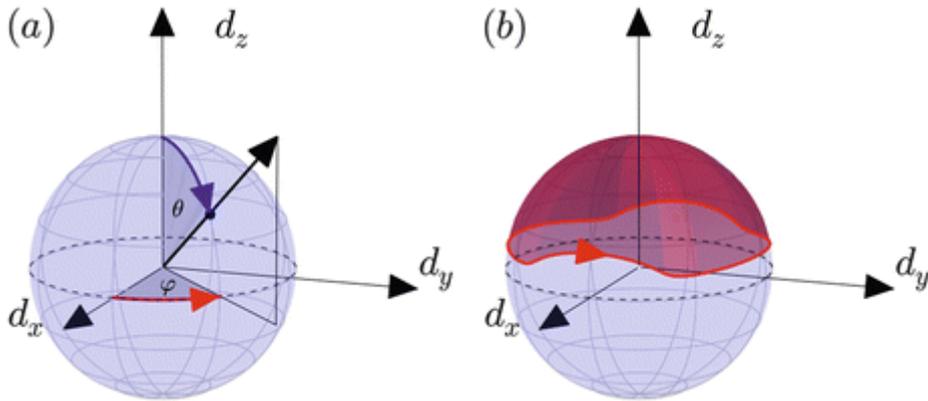


Figura 10 – Fase de Berry em um sistema de dois níveis

Experimentalmente é possível observar a existência dessa fase ao propôr um experimento onde podemos emitir um feixe elétrons que passa por um anteparo que por sua vez irá dividir o feixe em outros dois  $f_1$  e  $f_2$ . Depois dos feixes divididos, poderemos obter uma situação em que  $\mathbf{B}$  de  $f_2$  não esteja alinhado com relação à  $f_1$ . Em decorrer dos feixes estarem fora de fase, existe um contraste na intensidade da forma

$$I(\theta) = \cos^2[n\pi(1 - \cos \theta)], \quad (4.70)$$

onde o semi-ângulo  $\theta$  é devido ao movimento de  $\mathbf{B}$ .

## 4.4 Efeito Hall quântico

### 4.4.1 Níveis de Landau

Vamos considerar o seguinte hamiltoniano bidimensional para uma partícula na presença de um campo magnético uniforme e a princípio sujeito a um campo elétrico

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + q\phi, \quad (4.71)$$

onde  $\mathbf{A}$  e  $\phi$  são os potenciais vetor e escalar.

No eletromagnetismo temos que o campo magnético pode ser escrito como  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  e através da lei de Faraday obtém-se  $\mathbf{E} = -\nabla\phi - \partial\mathbf{A}/\partial t$  e se por ventura  $\mathbf{A}$  for constante é possível obter a expressão já conhecida para o campo elétrico. De fato não existe apenas um valor de  $\phi$  e  $\mathbf{A}$ , pois estes podem se transformar por uma transformação de calibre que matem  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$  incólumes. Considerando  $\psi$ ,  $\psi'$  dois autoestados que atuam em  $\hat{H}$  e  $\hat{H}'$  respectivamente, como a transformação de calibre é invariante esperamos obter uma equivalência entre os autoestados. Vamos admitir um potencial vetor singular da forma  $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\lambda$ . Olhando então para

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (4.72)$$

a força de Lorentz 3.22 pode ser escrita como

$$\mathbf{F} = -q\nabla\phi - q\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + q\nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}). \quad (4.73)$$

Na mecânica clássica podemos encontrar a seguinte relação:

$$F_k = \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{x}_k} - \frac{\partial U}{\partial x_k} \quad (4.74)$$

e podemos obter uma expressão para o potencial eletromagnético da forma  $U = q\phi - q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}$ . Assim, então a Lagrangiana  $\mathcal{L} = T - U$  do sistema assume a seguinte expressão

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}mv^2 - q\phi + q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}. \quad (4.75)$$

Podemos encontrar o momento conjugado a partir da Lagrangiana

$$p_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_k}. \quad (4.76)$$

Sendo assim temos que o momento pode ser escrito como

$$\mathbf{p} = \Pi + q\mathbf{A} \quad (4.77)$$

$$\therefore \Pi = \mathbf{p} - q\mathbf{A}, \quad (4.78)$$

onde  $\Pi$  é o momento cinético.

Seja o Hamiltoniano na presença de um campo magnético

$$H = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 - e\phi + V(\mathbf{r}), \quad (4.79)$$

temos que a equação de Schrödinger deve ser invariante por uma mudança de calibre da forma

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}_g = \mathbf{A} + \nabla\chi \quad (4.80)$$

$$\phi \rightarrow \phi_g = \phi - \dot{\chi}, \quad (4.81)$$

e vamos supor então uma mudança de calibre do tipo

$$\psi \rightarrow \psi_g = e^{i\alpha} \psi, \quad (4.82)$$

onde  $\alpha = \alpha(\mathbf{r}, t)$  é uma função a ser determinada.

Observemos que:

- $\nabla\psi_g = e^{i\alpha}[\nabla\psi + i\psi\nabla\alpha]$ ,
- $\nabla^2\psi_g = e^{i\alpha}[\nabla^2\psi + 2i\nabla\psi \cdot \nabla\alpha + i\psi\nabla^2\alpha - (\nabla\alpha)^2\psi]$ ,
- $\dot{\psi}_g = e^{i\alpha}[\dot{\psi} + i\dot{\alpha}\psi]$ ,

e tomando um valor pra  $\alpha = -e\chi/\hbar$ , a equação de Schrödinger para as variáveis  $g$  podem ser simplificadas mostrando que a equação de Schrödinger é invariante por mudança mediante o calibre escolhido,

$$i\hbar\frac{\partial\psi_g}{\partial t} = H_g\psi_g \rightarrow \psi_g = e^{-ie\chi/\hbar}\psi \rightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi. \quad (4.83)$$

Agora vamos supor que a partícula a ser considerada é um elétron, e que este esteja submetido à apenas a um campo magnético constante. Sendo assim  $\Pi = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$ . Portanto o hamiltoniano se reduz a

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\Pi}^2 \quad (4.84)$$

onde  $\hat{\Pi}$  é um operador hermitiano.

**Definição 4.4.1** *Sejam  $A, B$  operadores:  $[A, B] = \sum_j a_j |j\rangle \langle j| \left( \sum_k b_k |k\rangle \langle k| \right) - \sum_k b_k |k\rangle \langle k| \left( \sum_j a_j |j\rangle \langle j| \right) = AB - BA$*

*é definido como comutador de  $A$  e  $B$ .*

**Definição 4.4.2** *Sejam  $A, B$  operadores:  $\{A, B\} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$*

*é definido como parênteses de Poisson.*

**Teorema 4.4.1** *Dados dois operadores hermitianos  $A$  e  $B$ , então  $[A, B] = 0 \iff \exists \{|j\rangle\}$  tal que  $A = \sum_j^k a_j |j\rangle \langle j|$  e  $B = \sum_j^k b_j |j\rangle \langle j|$ , o que implica  $A$  e  $B$  serem diagonais.*

Dado que o sistema é bidimensional, de modo que  $\hat{\Pi} = \pi_i + \pi_j = m\dot{x}_i + m\dot{x}_j$ , então é deveras interessante analisarmos a relação de comutação entre as coordenadas de  $\hat{\Pi}$ . No entanto utilizaremos a definição de parenteses de Poisson para calcular a relação  $\{\pi_i, \pi_j\}$ , pois como aqui fora considerado  $\mathbf{p} = \partial\mathcal{L}/\partial\mathbf{x}$ . De fato cobiçamos herdar alguma relação macia que nos forneça algum resultado satisfatório. Sendo assim iremos apreciar  $[\pi_i, \pi_j]$  a partir de  $\{\pi_i, \pi_j\}$ , verificando se  $\pi_i$  e  $\pi_j$  são observáveis compatíveis ou não. desta forma, pincelando o olhar sobre a solução do parênteses de Poisson temos

$$\{\pi_i, \pi_j\} = \{m\dot{x}_i, m\dot{x}_j\} \quad (4.85)$$

$$= \{p_i + eA_i, p_j + eA_j\} \quad (4.86)$$

$$= -e \left( \frac{\partial A_j}{\partial x^i} - \frac{\partial A_i}{\partial x^j} \right) = -e\epsilon_{ijk} B_k, \quad (4.87)$$

então

$$[\pi_i, \pi_j] = -e\epsilon_{xy}B_z = -e_z. \quad (4.88)$$

Agora vamos introduzir operadores semelhantes ao de levantamento e abaixamento, semelhantes ao que já é conhecido para o oscilador harmônico quântico. Sejam os operadores de *abaixamento* e *levantamento* dados respectivamente por

$$a = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}}(\pi_x - i\pi_y), \quad (4.89)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}}(\pi_x + i\pi_y), \quad (4.90)$$

podemos reescrever o hamiltoniano a partir dele e teremos que a forma do Hamiltoniano será equivalente a de um oscilador harmônico

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\Pi}^2 = \frac{1}{2m}(\pi_x - i\pi_y)(\pi_x + i\pi_y) = \frac{e\hbar B}{2me\hbar B}(\pi_x^2 + \pi_y^2 + i[\pi_x, \pi_y]) = \hbar\omega_c \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (4.91)$$

e ao introduzir um estado  $|n\rangle$ , temos  $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$  e  $a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$ , logo ao resolvermos  $\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$ , temos então

$$\boxed{E_n = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right)}, \quad (4.92)$$

com  $n \in \mathbf{R}$ . Na presença de um campo magnético os níveis energéticos de uma partícula são quantizados discretamente para valores inteiros de  $n$ . O espaçamento entre os níveis de energia é proporcional a intensidade do campo magnético e esses níveis de energia são denominados níveis de Landau.

Por outro lado podemos definir uma mudança de calibre para resolver o Hamiltoniano na presença de um campo magnético. Considerando que  $B$  esteja na direção  $\hat{\mathbf{z}}$ , então temos que  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ . Aqui iremos impor que  $q\phi = 0$ , sendo assim de  $\hat{H}\Psi = E\Psi$  encontramos

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 \Psi = E\Psi. \quad (4.93)$$

Trabalhando com as variáveis impostas e reescrevendo a equação em termos das coordenadas de espaço derivadas do gradiente chegamos a seguinte equação diferencial parcial

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \left( \frac{\partial}{\partial y} - \frac{ieB}{\hbar} x \right)^2 \Psi + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi = 0. \quad (4.94)$$

Vamos chutar uma solução do tipo  $\Psi(x, y, z) = \exp\{i(\beta y + \gamma z)\}u(x)$  e substituir na equação diferencial parcial acima

$$e^{i(\beta y + \gamma z)}u''(x) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}e^{i(\beta y + \gamma z)}u(x) + \frac{2m}{\hbar}Ee^{i(\beta y + \gamma z)}u(x) + \left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{ieBx}{\hbar}\right)^2 e^{i(\beta y + \gamma z)}u(x) = 0. \quad (4.95)$$

E organizando os termos de tal forma para deixar a equação em função de  $U(x)$  chegamos a

$$u''(x) + \left[ \frac{2mE}{\hbar^2} - \gamma^2 - \left( \beta - \frac{eBx}{\hbar} \right)^2 \right] u(x) = 0, \quad (4.96)$$

e definindo  $\varepsilon = E - \frac{\hbar^2}{2m}\gamma^2$  e passando  $\varepsilon$  para o lado direito da equação, podemos reescrever a EDP como

$$-\frac{\hbar}{2m}u''(x) + \frac{m}{2} \left( \frac{eB}{m}x - \frac{\beta\hbar}{m} \right)^2 u(x) = E'u(x). \quad (4.97)$$

Ao olhar carinhosamente para o termo entre parênteses, percebe-se que usando um truque simples e audaz, podemos obter uma equação semelhante a de um oscilador harmônico quântico. Chamando o termo  $e\beta/\mu = \omega_c$ , vamos reescrever o termo entre parênteses da equação 4.97 como

$$\left( \frac{eB}{m}x - \frac{\beta\hbar}{m} \right)^2 = \left( \omega_c x - \frac{\beta\hbar}{m} \right)^2 = \omega_c^2 \frac{\mu}{2} \left( x - \frac{\beta\hbar}{m\omega_c} \right)^2 = \omega_c^2 \frac{\mu}{2} (x - x_0)^2, \quad (4.98)$$

onde chamamos  $\frac{\beta\hbar}{m\omega_c} = x_0$  e por fim a equação 4.97 se torna

$$-\frac{\hbar}{2m}u''(x) + \omega_c^2 \frac{m}{2} \frac{\mu}{2} (x - x_0)^2 u(x) = E'u(x), \quad (4.99)$$

que é a equação de um oscilador harmônico em torno de  $x_0$ , cujos os autovalores de energia são dados por

$$\varepsilon = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c, \quad (4.100)$$

e da definição que havíamos feito para relacionar  $\varepsilon$  e  $E$ , obtemos a seguinte equação

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2}{2\mu}k_z^2, \quad (4.101)$$

sendo que o segundo termo na equação acima está relacionado com um certo *shift* de energia na direção de  $k_z$ , no entanto esse termo será igual a zero, pois temos que os níveis de Landau estão em  $2D$ , portanto

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c. \quad (4.102)$$

#### 4.4.2 Estados de Bloch na presença de um campo magnético uniforme

Queremos estudar os estados de Bloch a partir de uma condição de contorno periódica, que como o título da sessão sugere, surge a partir da presença de um campo magnético uniforme. Vamos considerar um sistema em duas dimensões que contenha elétrons não interagentes entre si que sintam a influência de um campo magnético perpendicular ao plano que estão estão. Podemos escrever a seguinte equação de autovalores

$$\left[ \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + e \frac{\mathbf{A}}{c} \right)^2 + U(x, y) \right] |\psi\rangle = \varepsilon |\psi\rangle \quad (4.103)$$

o termo entre colchetes é o Hamiltoniano  $\hat{H}$  do sistema, onde  $\mathbf{p}$  é o momento do elétron,  $\mathbf{A}$  é o potencial vetor e  $U(x, y)$  é uma função que depende do potencial. Suponha então que  $U(x, y)$  seja uma função periódica e contínua, tal que seja válida a expressão

$$U(x, y) = U(x + a, y) = U(x, y + b) \quad (4.104)$$

observando a relação acima é fácil ver que ao longo das direções canônicas do plano  $xy$   $U(x, y)$  permanecesse invariante por translação. Este fato, a primeira instância, levá-nos intuitivamente a supor que o Hamiltoniano também seja invariante por translação. Entretanto existe um leve detalhe que nós não podemos deixar passar despercebido que é o fato de que quando observamos o potencial vetor, ele não é constante ao longo das direções canônicas, apesar que o campo magnético é uniforme e conseqüentemente isso faz com que o Hamiltoniano não seja invariante por translação. É interessante fazermos que o Hamiltoniano também seja invariante por translação e para isso vamos introduzir um formalismo que possa suprir esse detalhe.

Seja  $\mathbf{R}$  um vetor da rede de bravais. Para cada vetor  $\mathbf{R}$  podemos definir um operador de translação  $\hat{T}_R$  que ao aplicado a uma função suave qualquer, ele irá transladar o argumento da função em um fator de  $\mathbf{R}$ . Da literatura temos que  $\hat{T}_R$  é definido por

$$\hat{T}_R = e^{i\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{R} / \hbar} \quad (4.105)$$

Aplicando  $\hat{T}_R$  na equação 4.103

$$\hat{T}_R \hat{H} |\psi\rangle = \hat{T}_R \left[ \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + e \frac{\mathbf{A}}{c} \right)^2 + U(x, y) \right] |\psi\rangle, \quad (4.106)$$

de imediato já sabemos que  $U(x, y) = U(\mathbf{r})$  é invariante. O objetivo nesse instante é descobrir se  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  será invariante ou não, porém  $\mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  nem sempre será igual a  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ . Isso se dá ao fato de que uma vez que o campo magnético é uniforme  $\mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  e  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  irão diferir por um gradiente de uma função  $h(\mathbf{r})$ , tal que

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) + \nabla h(\mathbf{r}) \quad (4.107)$$

Por fim iremos considerar um operador de translação não em relação ao vetor  $\mathbf{r}$  e sim ao campo magnético  $B$ , representado por  $\hat{M}_R$ . Queremos que este operador torne o Hamiltoniano

invariante por translação. Esse operador já havia sido introduzido de maneira simplória quando falamos sobre os níveis de Landau a partir da equação ???. Agora iremos introduzi-lo de maneira mais formal.

Considerando um sistemas com elétrons em um campo magnético uniforme, o operador do hamiltoniano assume a seguinte forma  $\hat{H} = \mathbf{P} + e/c \mathbf{A}$ . A partir de uma translação infinitesimal  $\hat{M}_R(dx)$ , vamos considerar que  $\hat{M}_R |\psi\rangle = \hat{M}_R |\psi''\rangle$ . O operador  $\hat{T}_R$  satisfaz a propriedade de que  $\hat{T}_R(dx) = 1 - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}$  e temos que o valor esperado do operador momento é o próprio momento. Sendo assim

$$\langle \psi | \mathbf{P} + \frac{e\mathbf{A}}{c} | \psi \rangle = \langle \psi'' | \mathbf{P} + \frac{e\mathbf{A}}{c} | \psi'' \rangle , \quad (4.108)$$

$$(1 + i\mathbf{K} \cdot dx) \left( \mathbf{P} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) (1 - i\mathbf{K} \cdot dx) = \left( \mathbf{P} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) . \quad (4.109)$$

$$(4.110)$$

Abrindo as contas e desprezando os termos de ordem maior que 1 chegamos a

$$\left( \mathbf{P} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) - i \left( \mathbf{P} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \mathbf{K} \cdot d\mathbf{x} + i \left( \mathbf{P} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \mathbf{K} \cdot d\mathbf{x} = \mathbf{P} + \frac{e\mathbf{A}}{c} , \quad (4.111)$$

$$- \left( \mathbf{P} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \mathbf{K} + \left( \mathbf{P} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \mathbf{K} = 0 , \quad (4.112)$$

$$\therefore [\mathbf{K}, (\mathbf{P} + e\mathbf{A}/c)] = 0 . \quad (4.113)$$

Ainda podemos tirar das relações acima o valor de  $\mathbf{K}$

$$\mathbf{K} = \left( \mathbf{P} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \quad (4.114)$$

Aqui iremos usar uma consequência que é obtida ao aplicar o operador de translação em um intervalo finito  $\Delta\mathbf{x}$  ,

$$\hat{T}_R(\Delta\mathbf{x}) = e^{-i\mathbf{K} \cdot \Delta\mathbf{x}} , \quad (4.115)$$

e portanto, substituindo o valor de  $\mathbf{K}$  na equação acima obtemos para o  $\hat{M}_R$

$$\hat{M}_R(a) = e^{-i(\mathbf{P} - e\mathbf{A}/c) \cdot a} . \quad (4.116)$$

Agora vamos considerar uma simetria de gauge da forma  $\mathbf{A} = (\mathbf{B} \times \mathbf{r})/2$ , logo nosso operador de translação assume a forma

$$\hat{M}_R(R) = \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \mathbf{R} \cdot [2\mathbf{P} + e(\mathbf{r} \times \mathbf{B})] \right\} \quad (4.117)$$

$$= \hat{T}_R \exp \left\{ \frac{ie}{2\hbar} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{r} \right\} \quad (4.118)$$

E temos que  $\hat{M}_R$  comuta com o Hamiltoniano. Sendo assim obtemos um operador tal que  $H$  se torna invariante por translação na presença de um campo magnético uniforme.

Em geral temos que dados dois operadores que atuem em direções distintas não irão comutar, pois  $\hat{M}_a \hat{M}_b = \exp\{2\pi i \phi\} \hat{M}_b \hat{M}_a$  o que implica  $[M_a, M_b] \neq 0$ . O termo  $\phi$  é definido como número de fluxo magnético através da célula unitária e é atribuído a quantidade  $(2eB/\hbar)ab$ . Se tivermos o caso que  $\phi = p/q$  com  $p, q \in \mathbb{Z}$  for uma quantidade racional, não teremos há existência de orbitas periódicas, ou seja, queremos dizer que o movimentos nunca vai voltar ao ponto inicial, entretanto irá sempre convergir ao ponto de início, mas nunca coincidindo com o mesmo.

Vamos considerar um vetor da rede de Bravais dado por  $\mathbf{R}' = nq\mathbf{a} + m\mathbf{b}$ . O operador de translação agora estará relacionado com esse novo vetor da rede de Bravais. Seja a autofunção  $|\psi\rangle$ , iremos atuar com  $\hat{M}_{R'}$  sobre ela, tal que os autovalores para  $\hat{M}_{q\mathbf{a}}$  e  $\hat{M}_{\mathbf{b}}$  assumem a seguinte forma

$$\hat{M}_{q\mathbf{a}} |\psi\rangle = e^{ik_1 qa} |\psi\rangle \quad (4.119)$$

$$\hat{M}_{\mathbf{b}} |\psi\rangle = e^{ik_2 b} |\psi\rangle \quad (4.120)$$

onde  $k_1$  e  $k_2$  são vetores de onda relativos ao movimento do elétron no cristal e podem ser restritos na zona de Brillouin desde que  $-\pi/qa < k_2 < \pi/qa$  e também  $-\pi/b < k_2 < \pi/b$ . Podemos então escrever as funções de onda na forma de Bloch e indexando um índice  $n$  que irá representar um banda

$$\psi_{k_1 k_2}^n(x, y) = e^{i(k_1 x + k_2 y)} u_{k_1 k_2}^n(x, y) \quad (4.121)$$

A partir das equações 4.118 e 4.120 chegamos a

$$u_{k_1 k_2}^n(x + qa, y) = e^{-i\pi s y/b} u_{k_1 k_2}^n(x, y) \quad (4.122)$$

$$u_{k_1 k_2}^n(x, y + b) = e^{i\pi s x/qa} u_{k_1 k_2}^n(x, y) \quad (4.123)$$

onde  $s \in \mathbb{Z}$ .

#### 4.4.3 Quantização da condutância Hall $\sigma_H$

Para mostramos que a condutância hall é quantizada, devemos antes elaborar a fórmula de Kubo para a mesma. Para isto vamos considerar um hamiltoniano na presença de um campo elétrico externo que depende do tempo, atuando sobre os estados de Bloch

$$H(t) = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + e \frac{\mathbf{A} + \hat{i}E(t)t}{c} \right)^2. \quad (4.124)$$

Vamos reescrever este Hamiltoniano em termos do vetor de onda de Bloch, sendo assim vamos obter

$$H(k_1, k_2) = \left[ \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + e \frac{\mathbf{A} + \hat{i}E(t)t + \hbar \mathbf{k}}{c} \right)^2 \right]. \quad (4.125)$$

Vale ressaltar que iremos considerar  $E$  como o campo elétrico e  $\varepsilon$  será atribuído à energia do sistema. Usando teoria da perturbação dependente do tempo e denotando  $|u_{k_1 k_2}^\alpha(t)\rangle = |\alpha(t)\rangle$ , temos

$$|\Psi^\alpha(t)\rangle = \exp\left\{\frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_\alpha(t')\right\} \left[ |n; t\rangle + i\hbar \sum_{m \neq n} \frac{|m, t\rangle \langle m; t | \partial_t | n; t\rangle}{\varepsilon_m(t') - \varepsilon_n(t')} \right]. \quad (4.126)$$

Aqui  $|n; t\rangle$  representa um certo autoestado instantâneo e a soma é sobre todos os outros autoestados. Para o leitor que queira se aprofundar no assunto de teoria da perturbação dependente do tempo, recomendo ver a referência [31].

A partir das seguintes equações de autovalores

$$H(t) |n; t\rangle = \varepsilon_n |n; t\rangle, \quad (4.127)$$

$$H(t) |m; t\rangle = \varepsilon_m |m; t\rangle, \quad (4.128)$$

podemos encontrar uma relação em termos da derivada do Hamiltoniano

$$\langle m; t | \partial_t | n; t\rangle = \frac{\langle m; t | \partial_t H(t) | n; t\rangle}{\varepsilon_m(t') - \varepsilon_n(t')} \quad (4.129)$$

Agora vamos definir um operador arbitrário  $M$ . Atuando com o *braket* sobre  $M$  obtemos a seguinte relação

$$\langle \Psi^n(t) | M | \Psi^n(t)\rangle = \langle n; t | M | n; t\rangle + i\hbar \sum_{m \neq n} \frac{\langle n; t | M | m; t\rangle \langle m; t | \partial_t | n; t\rangle + \langle n; t | \partial_t | m; t\rangle \langle m; t | M | n; t\rangle}{\varepsilon_m(t') - \varepsilon_n(t')} \quad (4.130)$$

Na sessão sobre efeito Hall chegamos que a condutância podia ser escrita como

$$\sigma_{xy} = e \frac{\langle \Delta v_y \rangle}{\Delta E_x} \quad (4.131)$$

Vamos usar a ideia que fizemos com o operador arbitrário  $M$  na velocidade que está ao longo da direção  $y$  e ao substituir de volta na relação para a condutância obtém-se

$$\sigma_{xy} = e \frac{i\hbar}{E_x} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n; t | v_y | m; t\rangle \langle m; t | \partial_t | n; t\rangle + \langle n; t | \partial_t | m; t\rangle \langle m; t | v_y | n; t\rangle}{\varepsilon_m(t') - \varepsilon_n(t')}. \quad (4.132)$$

Utilizando a relação 4.129 e que  $\partial_t H(t) = \partial_t H(k_1 k_2) = eE_x v_x / c$ ,  $\sigma_{xy}$  toma a seguinte forma

$$\sigma_{xy} = e \frac{i\hbar}{E_x} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n; t | v_y | m; t\rangle \langle m; t | \partial_t H | n; t\rangle + \langle n; t | \partial_t H | m; t\rangle \langle m; t | v_y | n; t\rangle}{(\varepsilon_m(t') - \varepsilon_n(t'))^2} \quad (4.133)$$

$$= e^2 \frac{i\hbar}{c} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n; t | v_y | m; t\rangle \langle m; t | v_x | n; t\rangle + \langle n; t | v_x | m; t\rangle \langle m; t | v_y | n; t\rangle}{(\varepsilon_m(t') - \varepsilon_n(t'))^2}. \quad (4.134)$$

Queremos agora encontrar o elementos de matriz do operador velocidade  $v_x$  e  $v_y$ . De modo geral temos que que integrar sobre toda a célula unitária

$$\langle n; t | v_i | m; t\rangle = \delta_{k_1 k_1'} \delta_{k_2 k_2'} \int_0^{qa} dx \int_0^b dy u_{k_1 k_1'}^n (v_i u_{k_2 k_2'}^m), \quad (4.135)$$

onde os estados normalizados são dados por

$$\int_0^{qa} dx \int_0^b dy |u|^2 = 1 \quad (4.136)$$

Podemos escrever o operador velocidade  $v_i$  em termos da derivada de  $H_{k_1, k_2}$  a partir da equação 4.125 e considerando apenas os termos da diagonal obtemos

$$\langle n; t | v_i | m; t \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle n; t | \partial_{k_i} H | m; t \rangle \quad (4.137)$$

$$= \frac{1}{\hbar} (\varepsilon_m - \varepsilon_n) \langle n | \partial_{k_i} u^m \rangle \quad (4.138)$$

$$= -\frac{1}{\hbar} (\varepsilon_m - \varepsilon_n) \langle \partial_{k_i} u^n | m \rangle . \quad (4.139)$$

Para realizar as últimas passagens usamos a associação entre as equações de autovalores, onde derivamos ambos os lados em relação a  $K_i$ . Substituindo este resultado na equação 4.134 podemos chegar a uma equação que depende dos estados do sistema

$$\sigma_{xy} = i \frac{e^2}{\hbar c} \sum_{m \neq n} \langle \partial_{k_1} u^n | m \rangle \langle m | \partial_{k_2} u^n \rangle - \langle \partial_{k_2} u^n | m \rangle \langle m | \partial_{k_1} u^n \rangle . \quad (4.140)$$

Na mecânica quântica temos que a relação de completude é dada por  $\sum_{m \neq n} |n\rangle \langle n| + |m\rangle \langle m| = 1$  e a partir da equação 4.140, chegamos a

$$\sigma_{xy} = i \frac{e^2}{\hbar c} \left[ \langle \partial_{k_1} u^n | \partial_{k_2} u^n \rangle - \langle \partial_{k_2} u^n | \partial_{k_1} u^n \rangle \right] , \quad (4.141)$$

podemos ainda reescrever os *braket's* para a derivada dos estados  $u_{k_1 k_2}^n$  na forma integral.

$$|u_{k_1 k_2}^n\rangle = \delta_{k_1 k_2} \int d^2 r u_{k_1 k_2}^n = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int d^2 k \int d^2 r u_{k_1 k_2}^n \quad (4.142)$$

$$\therefore \partial_{k_1} |u_{k_1 k_2}^n\rangle = \frac{\partial}{\partial k} \delta_{k_1 k_2} \int d^2 r u_{k_1 k_2}^n = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int d^2 k \int d^2 r \frac{\partial}{\partial k} u_{k_1 k_2}^n . \quad (4.143)$$

Substituindo em 4.141 e considerando  $\hbar = h/2\pi$ , obtemos

$$\sigma_{xy}^n = \frac{1}{2\pi i} \frac{e^2}{\hbar c} \int d^2 k \int d^2 r \left( \frac{\partial u_{k_1 k_2}^{n*}}{\partial k_1} \frac{\partial u_{k_1 k_2}^n}{\partial k_2} - \frac{\partial u_{k_1 k_2}^{n*}}{\partial k_2} \frac{\partial u_{k_1 k_2}^n}{\partial k_1} \right) , \quad (4.144)$$

onde para cada valor inteiro de  $n$ , haverá uma contribuição  $\sigma_{xy}^n$  para a condutância Hall. Esse valor de  $n$  podemos entender como sendo uma representação para cada faixa de banda.

Seja o vetor de campo da zona de Brillouin dado por

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \int d^2 r u_{k_1 k_2}^{n*} \nabla_k u_{k_1 k_2}^n = \langle u_{k_1 k_2}^n | \nabla_k | u_{k_1 k_2}^n \rangle , \quad (4.145)$$

tal que

$$\nabla \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \int d^2 r \left( \frac{\partial u_{k_1 k_2}^{n*}}{\partial k_1} \frac{\partial u_{k_1 k_2}^n}{\partial k_2} - \frac{\partial u_{k_1 k_2}^{n*}}{\partial k_2} \frac{\partial u_{k_1 k_2}^n}{\partial k_1} \right) \quad (4.146)$$

$$\therefore \sigma_{xy}^n = \frac{1}{2\pi i} \frac{e^2}{\hbar c} \int d^2 k (\nabla \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2))_3 . \quad (4.147)$$

O índice 3 no termo entre parênteses representa a terceira componente do vetor resultante do rotacional.

Agora estamos interessados em entender sobre a ordem topológica do vetor de campo  $\mathbf{A}_n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ . Primeiramente vamos supor que  $u_{k_1 k_2}(x, y)$  satisfaça a equação de autovalores, logo  $u_{k_1 k_2}(x, y)e^{if(k_1, k_2)}$  também deve satisfazer, dado que  $f(k_1, k_2)$  é uma função arbitrária que não depende de  $(x, y)$ . Sendo assim vamos introduzir uma transformação em  $u_{k_1 k_2}(x, y)$  de tal maneira que

$$u_{k_1 k_2}(x, y)' = u_{k_1 k_2}(x, y)e^{if(k_1, k_2)} . \quad (4.148)$$

Podemos observar que a função introduzida é invariante por transformação pelo fato de  $f(k_1, k_2)$  não depender de  $(x, y)$ , além disso o estado  $|u_{k_1 k_2}(x, y)'\rangle$  irá obter um fator de fase. Agora iremos introduzir uma transformação para o vetor de campo  $\mathbf{A}_n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  da forma

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)' = \mathbf{A}_n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + i\nabla_k f(k_1, k_2) , \quad (4.149)$$

e esta transformação deixa a condutância Hall invariante.

Como comentado antes, a zona de Brillouin é homeomorfa a um torus  $\Pi^2 = S^1 \times S^1$ . Então iremos dividir  $\Pi^2$  em duas partes  $H^1$  e  $H^2$  de tal modo que os pontos  $q = (k_1^{(0)}, k_2^{(0)})$  estejam contidos em  $H^1$ . Podemos observar que o fator de fase geral do vetor de estados está bem definidos em  $q$

$$|u_{k_1 k_2}^1\rangle = e^{i\chi(k_1, k_2)} |u_{k_1 k_2}^2\rangle , \quad (4.150)$$

onde  $\chi(k_1, k_2)$  é uma função suave em  $\partial H$ . A topologia não trivial de  $|u_{k_1 k_2}\rangle$  é transferida ao vetor de campo  $\mathbf{A}_n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ . Podemos definir um vetor de campo para cada parte  $\{H^1, H^2\} \subset \Pi^2$  que evidentemente nos proporciona  $\mathbf{A}_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \in H^1$  e  $\mathbf{A}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \in H^2$ . Observando a equação 4.149, podemos relacioná-la com os vetores de campo  $\mathbf{A}_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  e  $\mathbf{A}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  devido a incompatibilidade de fase na equação 4.150. A transformação de calibre toma a seguinte forma em  $\partial H$

$$\mathbf{A}_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \mathbf{A}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + i\nabla_k \chi(k_1, k_2) . \quad (4.151)$$

Seguindo a ideia anterior de separar o torus em duas partes, podemos de certa maneira expandir a equação 4.152 em uma soma que dependa dos vetores referentes a cada parte de  $\Pi^2$ .

$$\sigma_{xy}^n = \frac{1}{2\pi i} \frac{e^2}{hc} \int d^2 k \left( \sum_{l=1}^p \nabla \times \mathbf{A}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \right)_3 . \quad (4.152)$$

Aqui de fato temos que  $p = \{1, 2\}$ , pois dividimos nosso torus em duas partes apenas. Primeiramente iremos abrir o somatório para os valores admitidos para  $p$  e posteriormente aplicar o teorema de Stokes para as regiões de  $H^1$  e  $H^2$  fixando a orientação positiva do fecho com

respeito a orientação dada por  $H^1$ . Assim obtendo

$$\sigma_{xy}^n = \frac{1}{2\pi i} \frac{e^2}{\hbar c} \left[ \int_{H^1} d^2k (\nabla \times \mathbf{A}_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)) + \int_{H^2} d^2k (\nabla \times \mathbf{A}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)) \right] \quad (4.153)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \frac{e^2}{\hbar c} \left[ \int_{\partial H} d\mathbf{k} (\mathbf{A}_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)) + \int_{-\partial H} d\mathbf{k} (\mathbf{A}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)) \right] \quad (4.154)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \frac{e^2}{\hbar c} \left[ \int_{\partial H} (\mathbf{A}_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) - \mathbf{A}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)) \cdot \hat{\mathbf{n}} dk \right]. \quad (4.155)$$

Por fim iremos tomar em mãos a transformação de calibre dada por 4.151 e substituindo na equação acima

$$\sigma_{xy}^n = \frac{1}{2\pi i} \frac{e^2}{\hbar c} \left[ \int_{\partial H} (\mathbf{A}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + i\nabla_k \chi(k_1, k_2) - \mathbf{A}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)) \cdot \hat{\mathbf{n}} dk \right] \quad (4.156)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \frac{e^2}{\hbar c} \int_{\partial H} i\nabla_k \chi(k_1, k_2) \cdot \hat{\mathbf{n}} dk \quad (4.157)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \frac{e^2}{\hbar c} n, \quad (4.158)$$

onde o termo  $n = \int_{\partial H} i\nabla_k \chi(k_1, k_2) \cdot \hat{\mathbf{n}} dk$  é conhecido como *Chern number* e ele é um valor inteiro, pois os vetores de estado devem apontar na mesma direção após completar uma volta em torno de  $\partial H$  [33].

A quantização a condutância está relacionada a diferença de fase adquirida entre as funções de onda localizadas em pontos com e sem singularidade. Os zeros da função de onda ocorrem para pontos onde o fluxo magnético atravessa a célula unitária, sendo assim quando temos a energia de fermi  $\varepsilon_F$  contida entre dois níveis de Landau, a condutância Hall é quantizada em valores inteiros de  $e^2/\hbar$ .

#### 4.4.4 Chern number

Considerando um Hamiltoniano dependente de um parâmetro contínuo  $\mathbf{R}$  e tomando uma superfície  $S$  contida no espaço de parâmetros. Ao integrar a curvatura de Berry do  $n$ -ésimo autoestado energia emanado por essa superfície, temos que o número de Chern dado por

$$Q^{(n)} = -\frac{1}{2\pi} \oint_S \Omega^{(n)} d\mathbf{S}. \quad (4.159)$$

Para mostrar que o número de Chern é um inteiro vamos considerar que a superfície  $S$  possui dois ramos:  $S_1$  e  $S_2$ , onde a orientação de  $S_2$  é oposta a de  $S_1$ . Calculando a fase de Berry em cada ramo da superfície a partir da conexão de Berry e usando o teorema de Gauss-Bonnet, temos

$$\gamma^{(n)} = \oint \mathbf{A}^{(n)} d\mathbf{l} = \int_{S_1} \Omega^{(n)} d\mathbf{S} + 2\pi m_1 = - \int_{S_2} \Omega^{(n)} d\mathbf{S} + 2\pi m_2, \quad (4.160)$$

onde  $m_1, m_2 \in \mathbb{Z}$ . Aqui usamos o teorema de Gauss-Bonnet que discutimos anteriormente em cada superfície, daí decorre o termo  $2\pi m_i$ , com  $i = 1, 2$ .

O número de chern do estado  $|n\rangle$  sobre  $S$  pode ser obtido integrando a curvatura de Berry em  $S_1$  e  $S_2$

$$Q^{(n)} = -\frac{1}{2\pi} \left[ \int_{S_1} \Omega^{(n)} d\mathbf{S} + \int_{S_2} \Omega^{(n)} d\mathbf{S} \right] \quad (4.161)$$

$$= -\frac{1}{2\pi} \left[ \int_{S_1} \Omega^{(n)} d\mathbf{S} - \int_{S_1} \Omega^{(n)} d\mathbf{S} - 2\pi m_1 + 2\pi m_2 \right] \quad (4.162)$$

$$= m_1 - m_2 \pmod{2\pi} . \quad (4.163)$$

Como o número de chern é um número inteiro em uma superfície fechada  $S$ , ele varia por deformações suaves do Hamiltoniano ou até mesmo da própria superfície. Devido a isso o número de Chern é um invariante topológico.

## 5 Considerações finais

Nesta monografia apresentamos conceitos básicos de topologia e geometria diferencial e também, elaboramos um texto sobre o efeito hall quântico. A topologia estuda os espaços topológicos e suas deformações, de grosso modo, podemos dizer que ela estuda as formas básicas dos objetos. Já a Geometria diferencial estuda medidas, ângulos, curvaturas destes objetos que a topologia trata, mas usando ferramentas de cálculo diferencial e ambas surgem facilmente em várias áreas da física. Devido a importância dessas áreas da matemática procuramos elaborar um texto mais acessível à alunos de graduação, em específico, os de física por não terem contato com disciplinas que tratem dos temas que me propus a estudar.

Antes de nos dedicarmos a fazer uma explicação teórica de maneira pedagógica do efeito Hall quântico (QHE), estudamos alguns conceitos importantes, em relação ao nosso assunto, de física do estado sólido, como o teorema de Bloch, rede recíproca, energia de fermi, etc. Ainda, maneira rápida, falamos um pouco sobre a dinâmica de um elétron sob ação de um campo magnético que nos possibilitou refletir sobre o efeito Hall clássico. Depois, investigamos os conceitos de aproximação adiabática e fase de Berry, pois como vimos a conexão de Berry está intimamente ligada ao número de Chern  $n$ , onde este mostra que condutância Hall  $\sigma_H$  é quantizada por valores inteiros da quantidade  $e^2/\hbar$ .

Como trabalhos subsequentes podemos abrir um leque de horizontes: *i)* Para considerar uma aproximação adiabática, antes, devemos ter em mente que o sistema estará evoluindo no tempo. No espaço de parâmetros teremos que os vetores irão se transportar paralelamente a superfície, mas sempre ao longo de uma curva geodésica, onde estas também evoluem com o tempo. Se considerarmos então pontos desta geodésicas e o levarmos a um espaço de fase teremos a existência de orbitas periódicas ou não. Quando nos depararmos com orbitas não-periódicas temos um sistema caótico. Podemos então dar condições de contorno e estudar em quais condições teremos que estes pontos contidos na curva geodésica serão caóticos. *ii)* O estudo de fluxos geodésicos. O espaço de parâmetros  $R$  é uma variedade  $M$ , podemos tentar estender esse espaço à uma variedade Riemanniana  $M_g^n$  e observar a qual superfície  $R$  será homeomorfa, ou seja, topologicamente equivalente. Ainda aplicar os conceitos de fluxo de Ricci que são equações diferenciais que evolui um tensor de curvatura da variedade  $M_g^n$  com métrica  $g_0$ . *iii)* Para trabalhos subsequentes também existe a possibilidade de estudar outras vertentes do (QHE), como por exemplo, o efeito Hall semi inteiro e posteriormente se aprofundar no estudo dos isolantes topológicos.



## Referências

- 1 CRANE, K.; PINKALL, U.; SCHRÖDER, P. Robust fairing via conformal curvature flow. *ACM Trans. Graph.*, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, v. 32, n. 4, jul. 2013. ISSN 0730-0301. Disponível em: <https://doi.org/10.1145/2461912.2461986>.
- 2 NOTES on topology. *In: COLLINS, L.T.* LoganThransherCollins.com. [S.l.], 2019. Disponível em: <https://logancollinsblog.com/2017/11/12/notes-on-topology/>. Acesso em: 9 dez. 2019.
- 3 A ESPANTOSA utilidade da matemática. *In: SIMÕES, M.* Imaginário Puro. [S.l.], 2019. Disponível em: <https://imaginariopuro.wordpress.com>. Acesso em: 9 dez. 2019.
- 4 DOMOS geodesicos. *In: WOLFSON, J.* Genesis Construções Geodésicas. [S.l.], 2019. Disponível em: [https://genesisgeodesica.com.br/index.php?option=com\\_content&view=category&layout=blog&id=31&Itemid=83](https://genesisgeodesica.com.br/index.php?option=com_content&view=category&layout=blog&id=31&Itemid=83). Acesso em: 9 dez. 2019.
- 5 ALIAS, A. *Evaluation 3: Surface Curvature*. Disponível em: <http://help.autodesk.com/view/ALIAS/2018/ENU/?guid=GUID-E44AB3A3-18DF-42F4-B4D4-870EFB42534A>. Acesso em: 11 dez. 2019.
- 6 EULER Characteristic. *In: Mathbygirl.* [S.l.], 2016. Disponível em: <https://mathsbyagirl.wordpress.com/tag/genus/>. Acesso em: 12 dez. 2019.
- 7 RESEARCHGATE. *Relations between macroscopic and microscopic observables*. 2012. Disponível em: [https://www.researchgate.net/figure/The-schematic-view-of-the-Fermi-sphere-and-Ek-F-vs-k-F-in-the-rest-frame-of-nuclear\\_fig5\\_288694477](https://www.researchgate.net/figure/The-schematic-view-of-the-Fermi-sphere-and-Ek-F-vs-k-F-in-the-rest-frame-of-nuclear_fig5_288694477). Acesso em: 10 dez. 2019.
- 8 KOSTERLITZ, J. M. Nobel lecture: Topological defects and phase transitions. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society, v. 89, p. 040501, Oct 2017.
- 9 HALDANE, F. D. M. Nobel lecture: Topological quantum matter. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society, v. 89, p. 040502, Oct 2017.
- 10 THOULESS, D. J. et al. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 49, p. 405–408, Aug 1982.
- 11 KING-SMITH, R. D.; VANDERBILT, D. Theory of polarization of crystalline solids. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 47, p. 1651–1654, Jan 1993.
- 12 KANE, C. L.; MELE, E. J.  $Z_2$  topological order and the quantum spin hall effect. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 95, p. 146802, Sep 2005.
- 13 BERRY, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London: A Mathematical and Physical Sciences*, London.
- 14 BERRY, M. Holonomy, the quantum adiabatic theorem, and Berry's phase. *Physical Review Letters*, v. 51, p. 2167–2170, 1983.

- 15 HATSUGAI, Y. Edge states in the integer quantum hall effect and the riemann surface of the bloch function. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 48, p. 11851–11862, Oct 1993.
- 16 ASHCROFT, N.; MERMIN, N. *Solid State Physics*. Philadelphia: Saunders College, 1976.
- 17 KLITZING, K. v.; DORDA, G.; PEPPER, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 45, p. 494–497, Aug 1980. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.494>>.
- 18 LAUGHLIN, R. B. Quantized hall conductivity in two dimensions. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 23, p. 5632–5633, May 1981. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.5632>>.
- 19 OLIVEIRA, A. R. d. *Formalidade geométrica e números de Chern em variedades flag*. Dissertação (Mestrado) — Universidade estadual de Campinas, , Instituto de Matemática Estatística e Computação Científica., Campinas, SP, 2015. Disponível em: <<<http://www.repositorio.unicamp.br/handle/REPOSIP/306784>>>.
- 20 CHERN, S. shen. Characteristic classes of hermitian manifolds. *Annals of Mathematics*, Annals of Mathematics, v. 47, n. 1, p. 85–121, 1946. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/1969037>>.
- 21 ARMSTRONG, M. A. *Basic topology*. London, England: Springer, 1979. (Undergraduate texts in mathematics.).
- 22 HATCHER, A. *Algebraic topology*. Cambridge: Proceedings of The Edinburgh Mathematical Society, 2003.
- 23 NAKAHARA, M. *Geometry, Topology and Physics*. London: "Institute of Physics Publishing", 2003.
- 24 CARMO, M. P. D. *Geometria Riemanniana*. 1ª edição. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 1979. (Projeto Euclides).
- 25 CARMO, M. P. D. *Differential Forms and Applications*. Rio de Janeiro: Springer-Verlag, 1994. (Textos universitários).
- 26 LIMA, R. F. *Introdução a geometria diferencial*. Natal: Sociedade brasileira de matemática - SBM, 2016.
- 27 NEWTON, R. G. Bloch-wave scattering by crystal defects. *Journal of Mathematical Physics*, v. 32, n. 2, p. 551–560, 1991. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.529392>>.
- 28 SYED, R. *Quantum Hall effect to Topological Insulators*. PhD Thesis, School of Physical Sciences, NISER, 2014.
- 29 PAULA, A. N. D. *Estrutura Eletrônica de Isolantes Topológicos via Teoria de Perturbação de Löwdin e Teoria de Grupos*. Dissertação (Trabalho de conclusão de curso) — Universidade Federal de Uberlândia - UFU, Uberlândia, 2016.
- 30 BOHM, A. et al. *The Geometric Phase in Quantum Systems*. Berlin: Springer-Verlag, 2003. (Theoretical and Mathematical Physics).

- 
- 31 SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. *Modern Quantum Mechanics*. 2. ed. Cambridge: Cambridge: University Press, 2017.
  - 32 FERREIRA, G. et al. Zitterbewegung and bulk-edge landau-zener tunneling in topological insulators. *Physical Review B*, 07 2018.
  - 33 AVRON, J. Y.; OSADCHY, D.; SEILER, R. A topological look at the quantum hall effect. *Physics Today*, v. 56, p. 38–42, 08 2003.