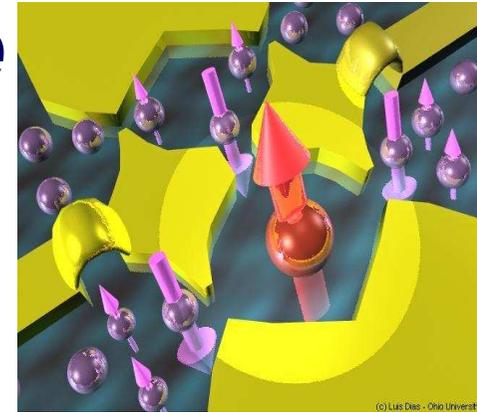


***“Mais é Diferente”*: o problema de muitos corpos em Matéria Condensada.**



Luis Gregório Dias da Silva

Depto. de Física dos Materiais e Mecânica - DFMT

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo -
IFUSP*



<http://www.fmt.if.usp.br/~luisdias> - luisdias@if.usp.br

Uma pergunta básica:

“Qual é a resposta para a vida, o universo e TUDO mais?”

Resposta (Google?):

42

“O Guia do Mochileiro das Galáxias” por Douglas Adams

Em Física, nosso “42” é expresso pela Eq. de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_{\text{universo}}\rangle = H_{\text{universo}} |\Psi_{\text{universo}}\rangle$$

“Teoria de Tudo” para o dia-a-dia.

R. B. Laughlin and David Pines, PNAS **97** 28-31 (2000)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_{\text{tudo}}\rangle = H_{\text{tudo}} |\Psi_{\text{tudo}}\rangle$$

No nosso dia-a-dia: “tudo”
são **elétrons**, **núcleos** e luz.

Energia cinética de
elétrons e **núcleos**

$$H_{\text{tudo}} = H_{\text{luz}} + \sum_j^{N_e} \frac{p_j^2}{2m_e} + \sum_{\alpha}^{N_n} \frac{P_{\alpha}^2}{2M_n}$$

Interação atrativa/repulsiva
entre **elétrons** e **núcleos**

$$- \sum_j^{N_e} \sum_{\alpha}^{N_n} \frac{Z_{\alpha} e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_{\alpha}|}$$

elétrons-núcleos

$$+ \sum_{j,k}^{N_e} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|}$$

elétrons-elétrons

$$+ \sum_{\alpha,\beta}^{N_n} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta} e^2}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}|}$$

núcleos-núcleos

Não incluímos *gravidade* e tb outras interações importantes mas menos influentes no nosso dia-a-dia (interações nucleares, forças forte/fraca, etc).

“Teoria de Tudo” não prevê tudo!

R. B. Laughlin and David Pines, PNAS **97** 28-31 (2000)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_{\text{tudo}}\rangle = H_{\text{tudo}} |\Psi_{\text{tudo}}\rangle$$

- Resolução exata apenas para sistemas pequenos ($N_e, N_n \sim 10-15?$).
- Sistemas grandes: são necessárias aproximações (LDA, GGA, etc)

Não prevê comportamentos importantes como:

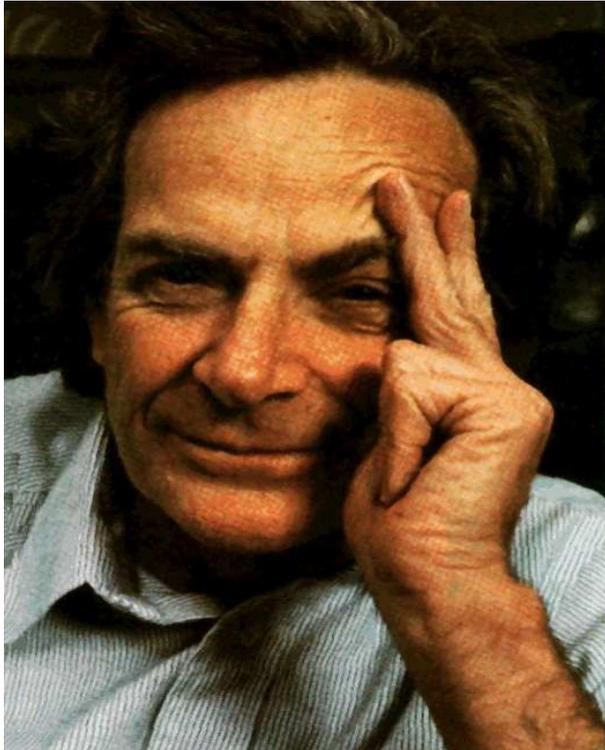
- Quantum de condutância no efeito Hall quântico ($=e^2/h$).
- Quantum de fluxo magnético ($=hc/2e$) em anéis supercondutores (ou no efeito Josephson).
- Campo magnético gerado por supercondutores em rotação ($=e/mc$).

Medição experimental de h, m e c !

Por quê???

São fenômenos físicos *emergentes!*

Mas não basta estudar os átomos?



“If, in some cataclysm, all of scientific knowledge were to be destroyed, **and only one sentence passed on to the next generation** of creatures, what statement would contain the most information in the fewest words?

I believe it is the *atomic hypothesis* that *All things are made of atoms—little particles that move around in perpetual motion, attracting each other when they are a little distance apart, but repelling upon being squeezed into one another.*“

In that one sentence, there is an enormous amount of information about the world, **if just a little imagination and thinking are applied.**

R. P. Feynman – *The Feynman Lectures*

Na verdade, “Mais é Diferente!”



Phil Anderson – Princeton
Prêmio Nobel – 1977

“ O comportamento de grandes e complexos agregados de partículas elementares não pode ser entendido em termos de uma simples extrapolação das propriedades de algumas poucas partículas.

Ao invés disso, a cada nível de complexidade, propriedades completamente novas aparecem e o entendimento desses novos comportamentos requer pesquisa que considero de natureza tão fundamental quanto qualquer outra.”

Phillip W. Anderson, “More is different”,
Science **177** 393 (1972)

Mecânica Quântica: sistemas de muitos corpos.

Uma partícula em uma “caixa”:

$$\hat{H}^{(1)} |\phi_i^{(1)}\rangle = E_i^{(1)} |\phi_i^{(1)}\rangle$$

Duas partículas *interagentes*

$$\hat{H} = \hat{H}^{(1)} + \hat{H}^{(2)} + \hat{V}_{1,2}$$

$$\hat{H} |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle$$

$$|\psi_k\rangle = |\phi_i^{(1)}\rangle \otimes |\phi_j^{(2)}\rangle \otimes |\psi_j^{(2)}\rangle$$

ij

$$E_k = E_k^{(1)} + E_k^{(2)}$$

(via diagonalização...)

$$\bar{\psi}_k^{S,A}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \pm \bar{\psi}_k^{S,A}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

Duas partículas *indistinguíveis* (bósons/férmions)

Sistema de Muitos Corpos

$$\hat{H} = \sum_a \hat{H}^{(a)} + \sum_{a \neq b} \hat{V}_{a,b}$$

$$|\psi_0\rangle = \sum_{ij \dots z} C_{ij \dots z}^0 |\psi_i^{(1)}\rangle \otimes |\psi_j^{(2)}\rangle \dots \otimes |\psi_z^{(N)}\rangle$$

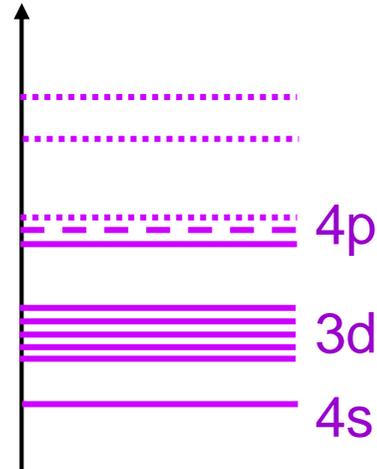
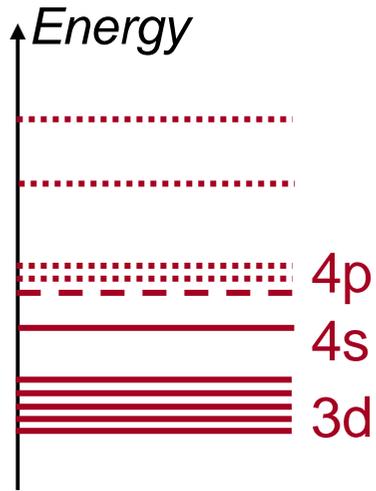
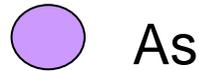
$$E_0 = ?$$

Estado Fundamental (muitas vezes, é só o que dá pra fazer!)

$$\psi_0^{S,A}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_\ell, \dots, \mathbf{r}_N) = \pm \psi_0^{S,A}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_\ell, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N)$$

N partículas *indistinguíveis* (bósons/férmions)

De “poucos” para “muitos”: um exemplo.



Níveis de energia
atômicos

Com algumas
aproximações:

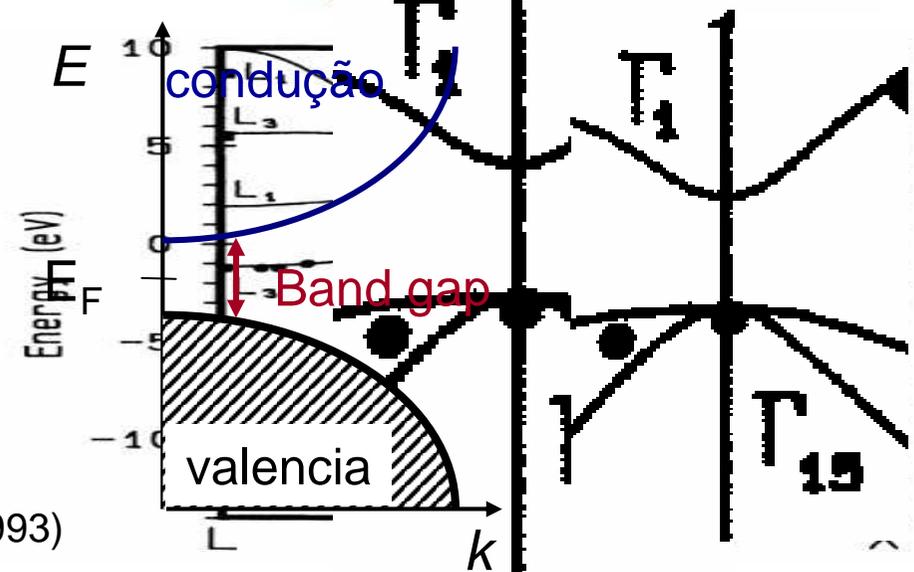
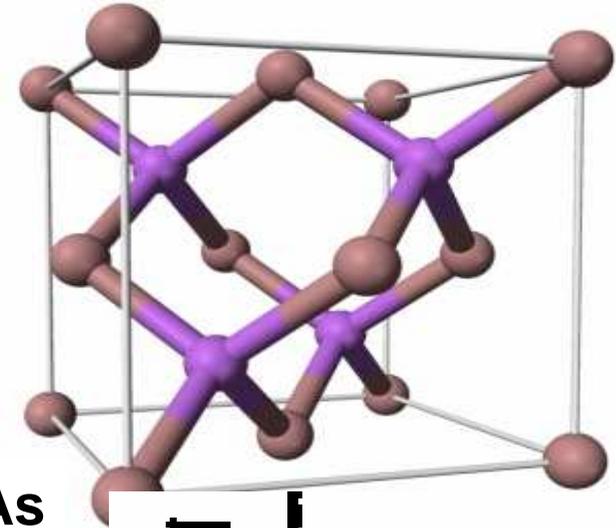
Estrutura de
bandas

Muitos átomos!

M. Rohlifing et al. PRB **48** 17791 (1993)

Muitos átomos!

Cristal de GaAs



É sempre possível calcular *a priori*?



“Nós, teóricos, somos capazes de fazer comentários precisos sobre uma dada substância se soubermos se ela é isolante, magnética, metálica, etc. Mas tomar uma dada **combinação de elementos a pre-dizer mesmo fatos triviais a priori** está além da nossa capacidade.”

Nós sabemos o porquê: as **diferenças de energia** entre diferentes formas estáveis de uma dada substância que determinam esse comportamento, são muito pequenas comparadas à energia química total e **é impossível – pelo menos até bem recentemente – calculá-las com precisão suficiente para ver diferença.**”

Phillip W. Anderson, “More and Different: Notes from a Thoughtful Curmudgeon”

Escalas de energia e comprimento.

Alguns números para se ter em mente:

■ *Escala Atômica (quântica):*

- Comprimento: $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0.53 \text{ \AA}$
- Energia: $\Delta E \sim 1 \text{ Ry} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = 13.6 \text{ eV}$

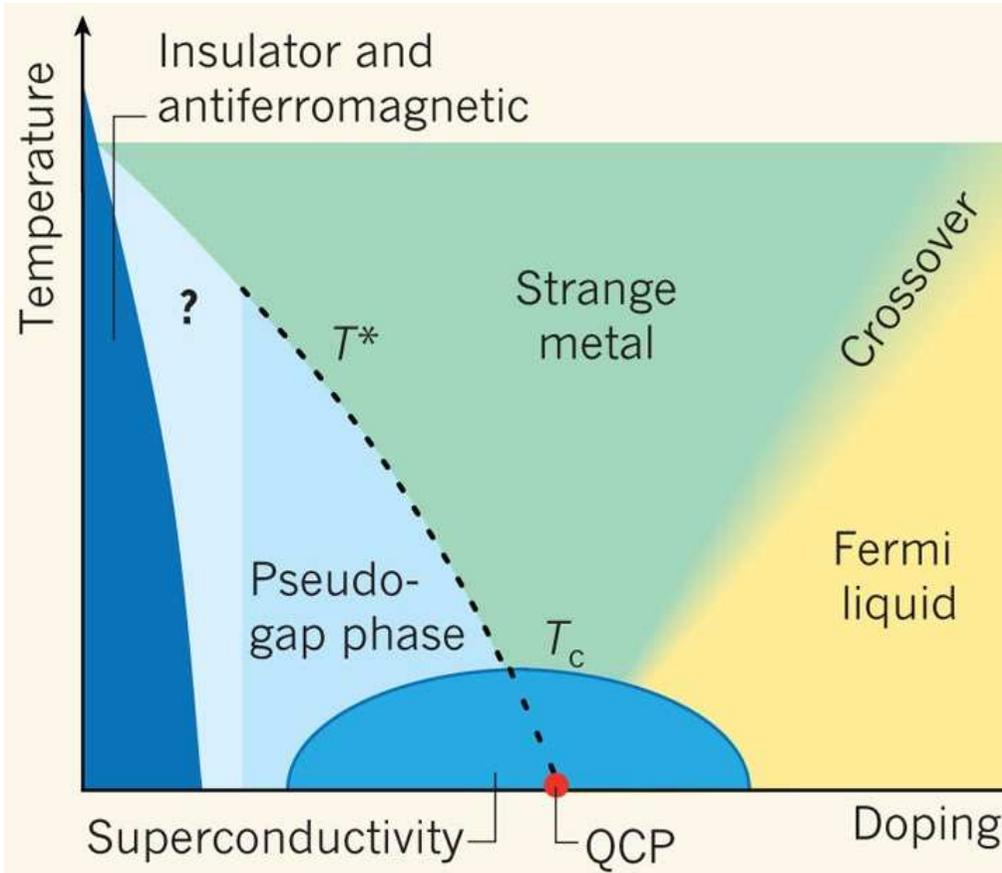
■ *Escala nanoscópica (quântica):*

- Comprimento:
 $\sim 10 - 100 \text{ nm} = 100-1000 \text{ \AA}$
- Energias típicas:
 $\Delta E \sim 0.1 - 1 \text{ meV} = 0.0001 \text{ Ry}$
- Temperatura:
 $1 \text{ meV}/k_B = 11.6 \text{ K}$

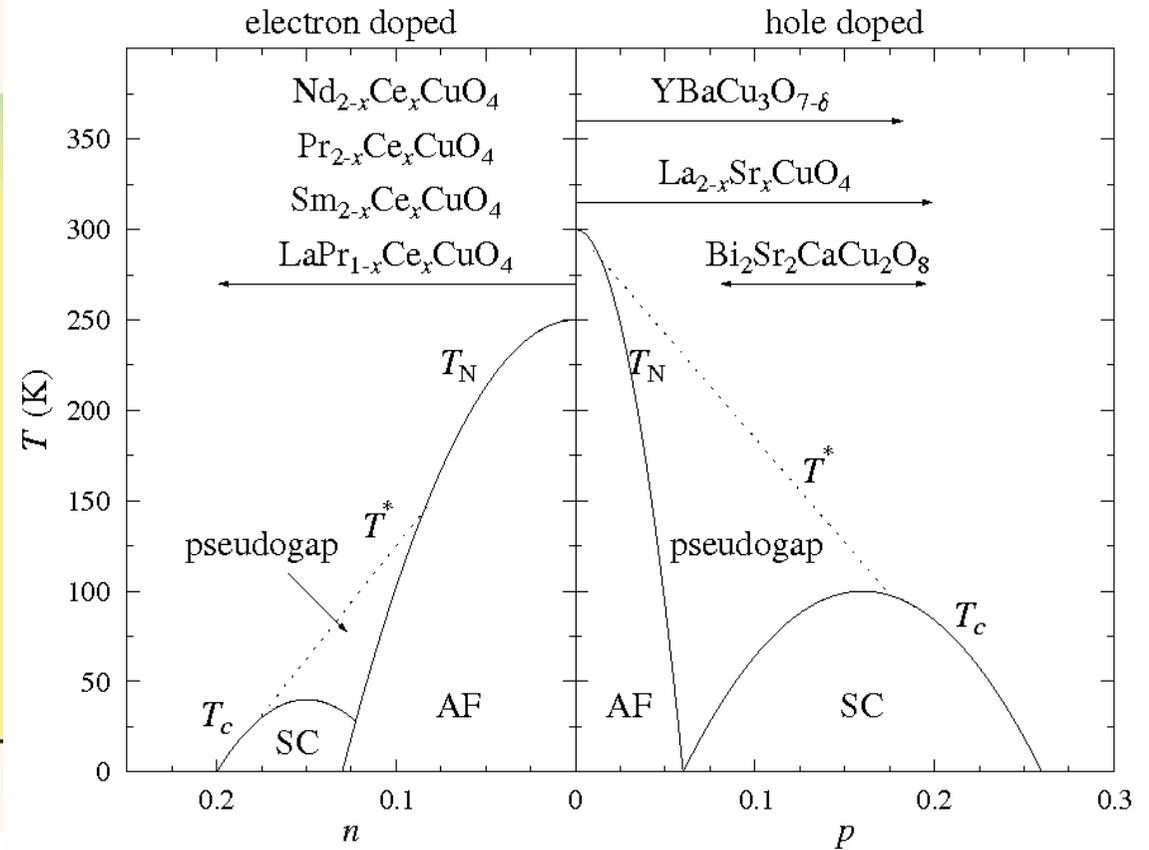
■ *Escala Macroscópica (clássica):*

- Comprimento:
 $\sim 1 \text{ mm} = 1\,000\,000 \text{ nm}$
- Energia (trabalho):
 $1 \text{ J} = \sim 6 \times 10^{18} \text{ eV}$
- Temperatura:
 $\sim 300 \text{ K} = 20 \text{ meV}/k_B$

Exemplo típico: cupratos de alta T_c .



C. Varma, Nature **468**, 184–185 (11 November 2010)



Moral da história: pouca mudança na composição química=GRANDE diferença no estado fundamental

Moral da história:



Robert Laughlin - Stanford
Prêmio Nobel – 1998



David Pines
U.C. Davis

Apenas uma teoria fundamental (“de tudo”) não nos dá a resposta em muitos casos.

Outros princípios igualmente fundamentais são necessários para a descrição correta de sistemas quânticos de muitos corpos

Robert B. Laughlin and David Pines, “Theory of Everything”
PNAS **97** 28-31 (2000)

A saída: *Modelos teóricos.*



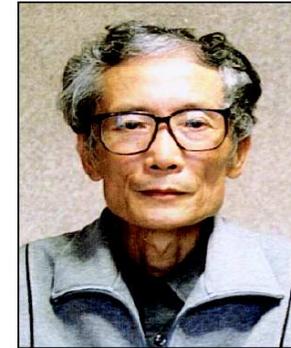
1) Tem que ser suficientemente **simples** para ser solúvel (ou pelo menos compreensível)

2) Tem que ser suficientemente **complexo** para ser interessante, na medida em que a sua complexidade contenha as características essenciais que simulem o comportamento observado no mundo real, preferencialmente algum aspecto que ainda não tenha sido explicado.

Phillip W. Anderson, “More and Different: Notes from a Thoughtful Curmudgeon”

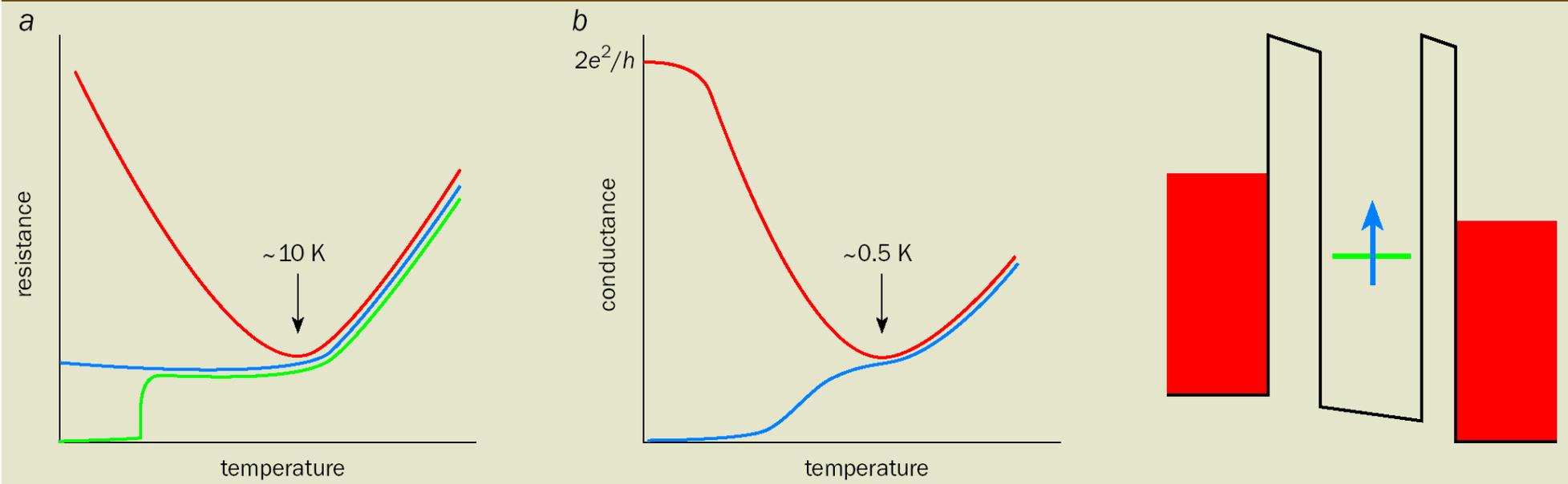
Exemplo de caso: o Efeito Kondo.

Revival of the Kondo effect



Leo Kouwenhoven and Leonid Glazman

1 The Kondo effect in metals and in quantum dots



Efeito Kondo

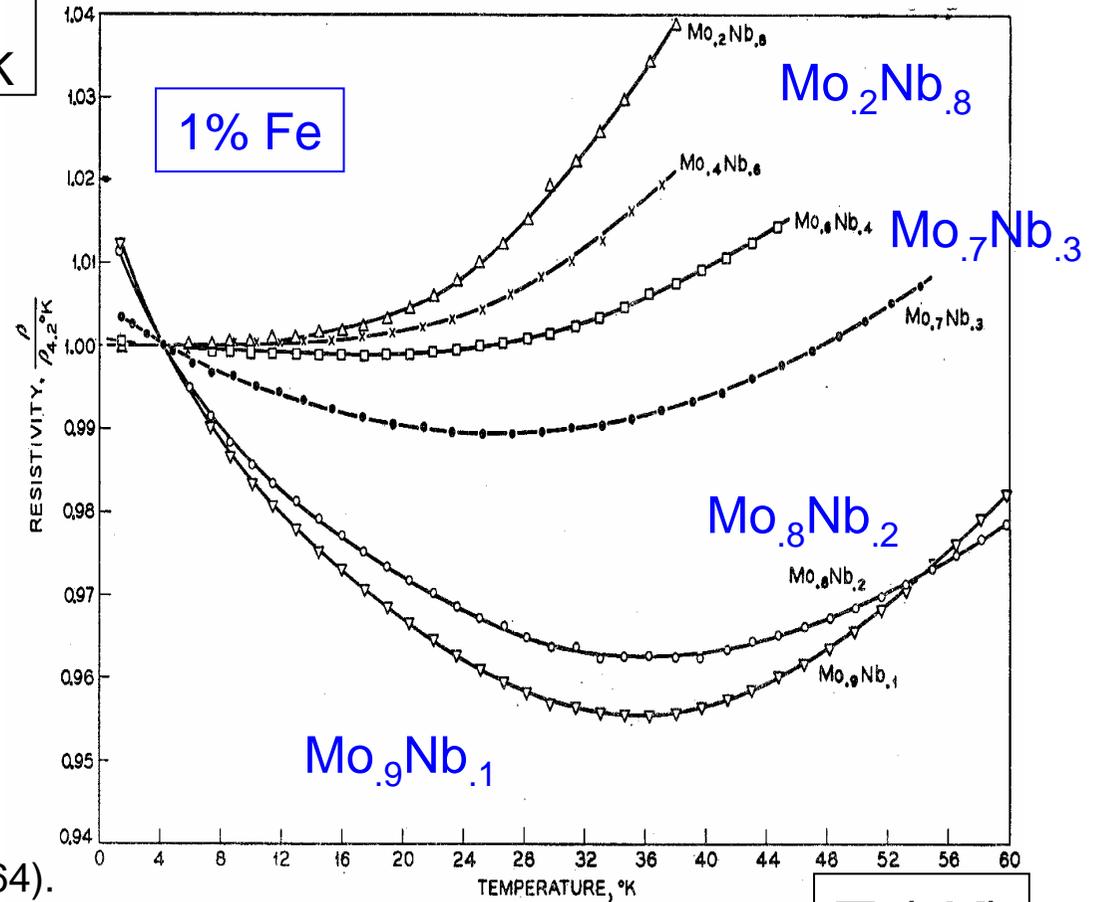
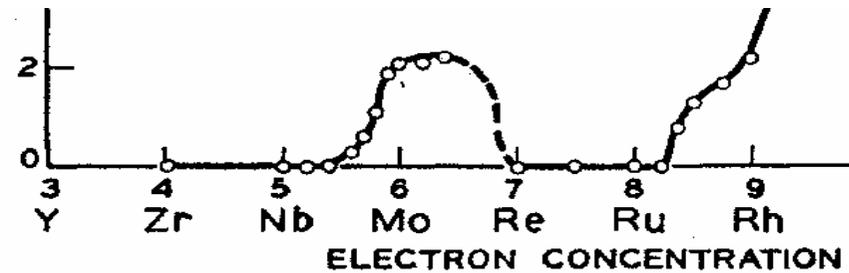
- Metals: resistividade $\rho(T)$ decresce **monotonicamente** com a temperatura (\sim lei de potência).

$$\rho/\rho_{4.2K}$$

- Metals com **impurezas magnéticas**:

- Anos 30 - **Minimo in $\rho(T)$** ; (T_{min} depende da concentração de impurezas c_{imp}).
- Anos 60 - Correlação entre a existência de um **momento magnético** no metal e o aparecimento do mínimo na resistência.

$$\mu_{Fe}/\mu_B$$



Top: A.M. Clogston *et al* Phys. Rev. **125** 541(1962).

Bottom: M.P. Sarachik *et al* Phys. Rev. **135** A1041 (1964).

T (°K)

A saída: *Modelos teóricos.*



1) Tem que ser suficientemente **simples** para ser solúvel (ou pelo menos compreensível)

2) Tem que ser suficientemente **complexo** para ser interessante, na medida em que a sua complexidade contenha as características essenciais que simulem o comportamento observado no mundo real, preferencialmente algum aspecto que ainda não tenha sido explicado.

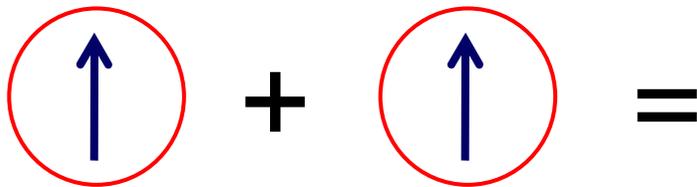
Phillip W. Anderson, “More and Different: Notes from a Thoughtful Curmudgeon”

Elemento básico do modelo: singleto de spin.

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$$

$$S = s_1 + s_2, s_1 + s_2 - 1, \dots, |s_1 - s_2|$$

Cada estado é $(2S+1)$ vezes degenerado: $S_z = S, S-1, \dots, -S$



Dois valores de S : $S = 1/2 + 1/2, |1/2 - 1/2| = 1, 0$
 $S = 1/2 + 1/2, |1/2 - 1/2| = 1, 0$

$$s_1 = 1/2$$

$$s_2 = 1/2$$

$S=1$ ($S_z = +1, 0, -1$): *Tripleto*

$$\begin{aligned} &|\uparrow\uparrow\rangle && S=1, S_z=+1 \\ 1/\sqrt{2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) && S=1, S_z=0 \\ &|\downarrow\downarrow\rangle && S=1, S_z=-1 \end{aligned}$$

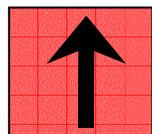
$S=0$ ($S_z=0$): *Singleto*

$$1/\sqrt{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad S=0, S_z=0$$

Modelo de Kondo ou modelo s-d

$$H_K = H_{\text{Impureza}} + H_{\text{Metal-impureza}} + H_{\text{Metal}}$$

Impureza de spin:



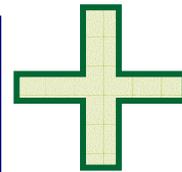
$$= \{ |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \}$$

Metal (banda s, não magnético):

$$\{ |\mathbf{k}s\rangle \}$$

\mathbf{k} é variável contínua
(espaço de Hilbert “infinito”)

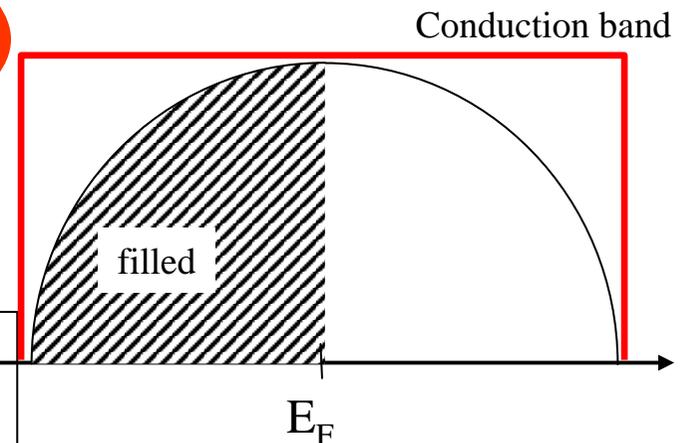
$$H_{\text{Imp}} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \epsilon_{\sigma} |\sigma\rangle \langle \sigma| = \begin{pmatrix} \epsilon_{\uparrow} & 0 \\ 0 & \epsilon_{\downarrow} \end{pmatrix}$$



$$H_{\text{metal}} = \sum_{\mathbf{k}s} \epsilon_{\mathbf{k}s} |\mathbf{k}s\rangle \langle \mathbf{k}s|$$

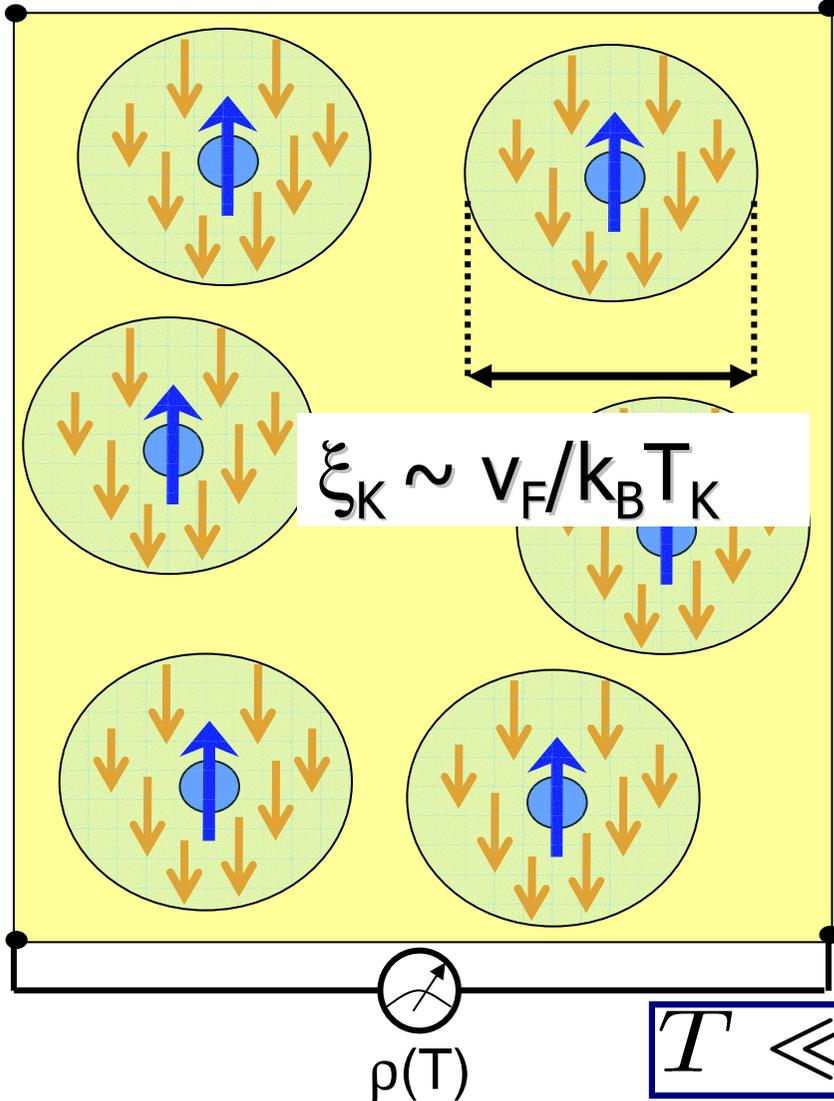
Graus de liberdade locais
(Espaço de Hilbert “finito”)

$\rho(\epsilon)$
Densidade de estados

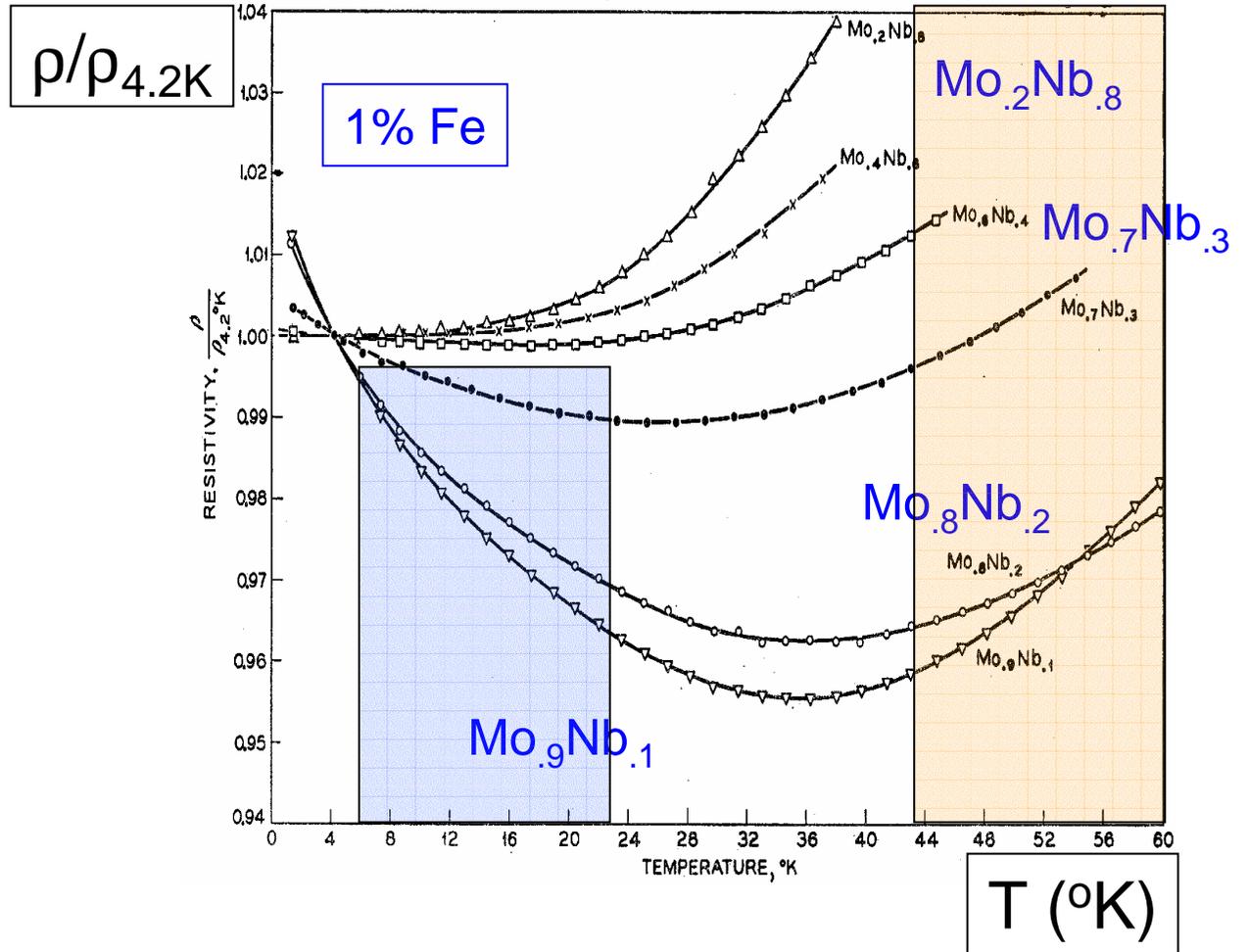


Complexidade: estado fundamental de H_K **não é** uma combinação simples de estados de H_{Imp} e H_{Metal} .

Efeito Kondo



M.P. Sarachik *et al* Phys. Rev. **135** A1041 (1964).



Escala de energia característica:
 Temperatura atômica e resistividade
 Temperatura de Kondo $(k_B T_K)$
 resistividade atômica (usual)

Modelo de Kondo no paradigma de Anderson.



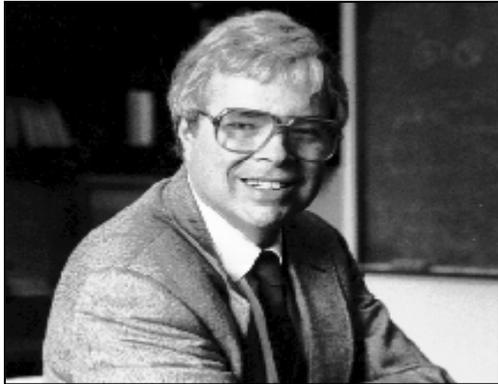
1) Tem que ser suficientemente **simples** para ser **solúvel (?)** (ou pelo menos compreensível)

Até os anos 60, não havia uma solução completa.

2) Tem que ser suficientemente **complexo** para ser interessante, na medida em que a sua complexidade contenha as características essenciais que simulem o comportamento observado no mundo real, preferencialmente algum aspecto que ainda não tenha sido explicado. **OK!**

Phillip W. Anderson, “More and Different: Notes from a Thoughtful Curmudgeon”

Grupo de Renormalização Numérico (NRG):



Kenneth G. Wilson –
Prêmio Nobel em
Física (1982)
“por sua teoria de
fenômenos críticos
em conexão com
transições de fase”

- Desenvolvido por Ken Wilson nos anos 70.
- Desenhado para tratar do “problema de Kondo” em sistemas de impurezas magnéticas em metais: Teoria de perturbação · “divergências no infravermelho”.

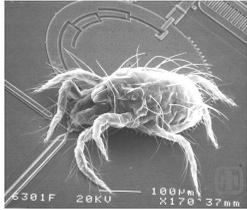
Elementos chave no procedimento de NRG:

1. **Separação logarítmica** de escalas de energia · Mapeamento em um modelo de tight binding.
2. **“Amostragem seletiva”** do espaço de Hilbert: mantém alguns estados, descartando outros.
3. **Solução numérica iterativa**: “fluxo” do GR revela a Física de baixas energias.

Complexidade em diferentes Escalas e Dimensões

“A escala das coisas” (US DOE-BES)

Things Natural



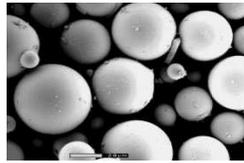
Dust mite
↔
200 μm



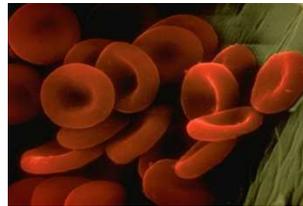
Human hair
~ 60-120 μm wide



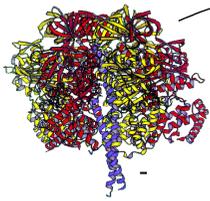
Ant
~ 5 mm



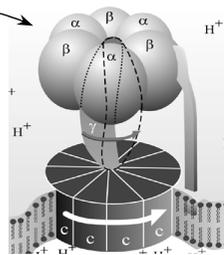
Fly ash
~ 10-20 μm



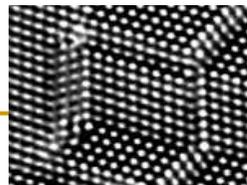
Red blood cells
(~7-8 μm)



~10 nm diameter



ATP synthase



Atoms of silicon
spacing ~tenths of nm

Things Manmade

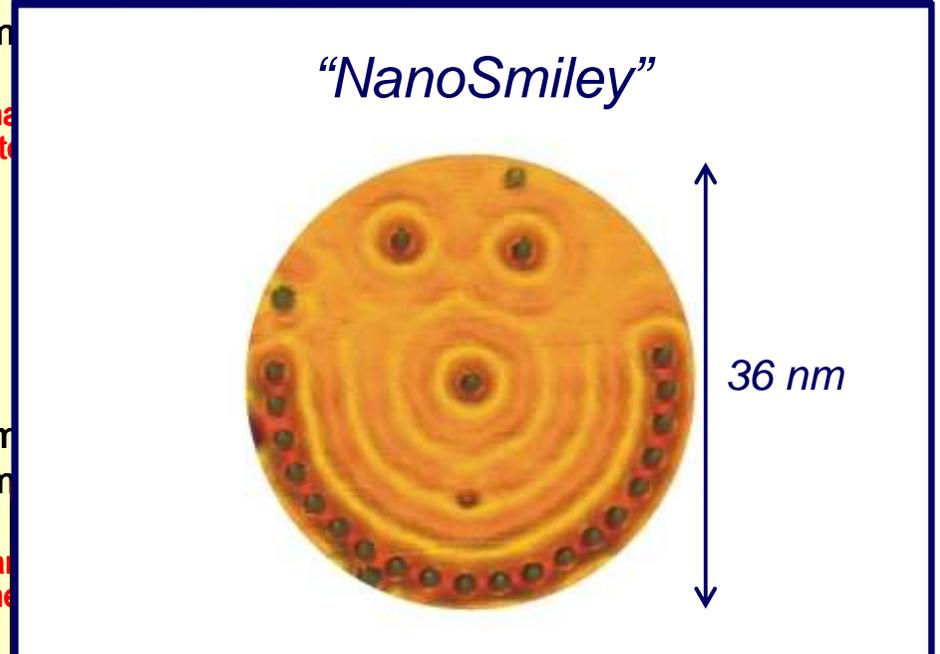
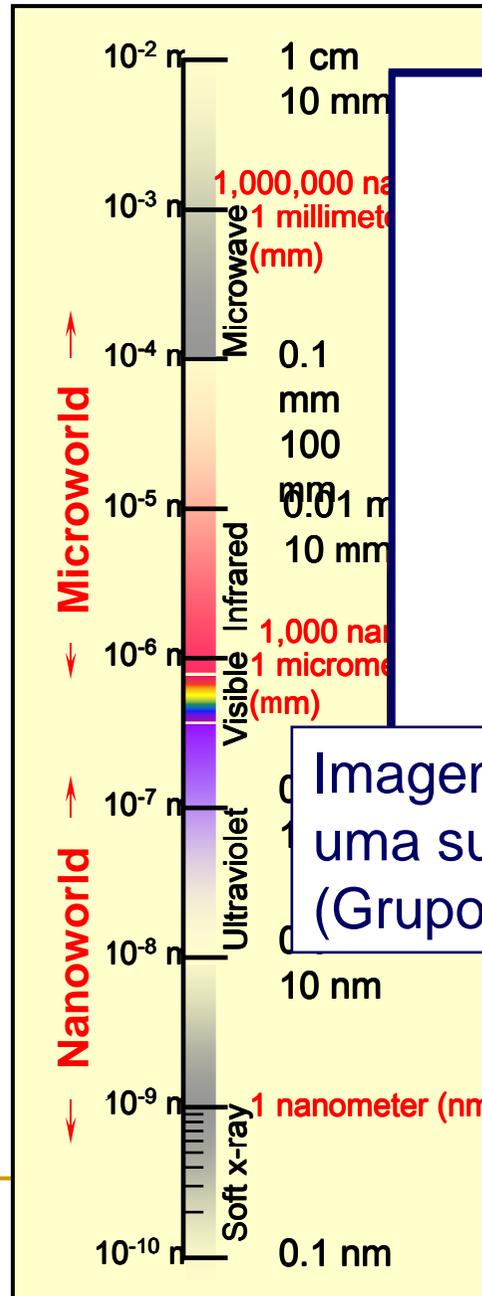
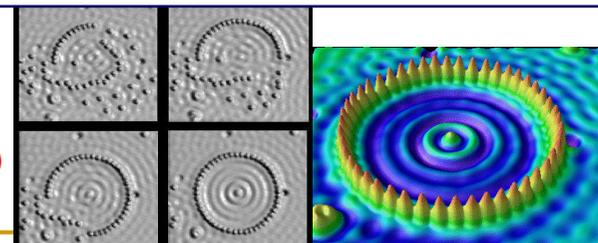


Imagem de STM de átomos de Ag em uma superfície de Ag(111).
(Grupo do Prof. Saw Hla, Ohio University)



Quantum corral of 48 iron atoms on Cu surface
positioned one at a time with an STM tip
Corral diameter 14 nm



Carbon nanotube
~1.3 nm diameter

Escalas de energia e comprimento.

Alguns números para se ter em mente:

■ *Escala Atômica (quântica):*

- Comprimento: $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0.53 \text{ \AA}$
- Energia: $\Delta E \sim 1 \text{ Ry} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = 13.6 \text{ eV}$

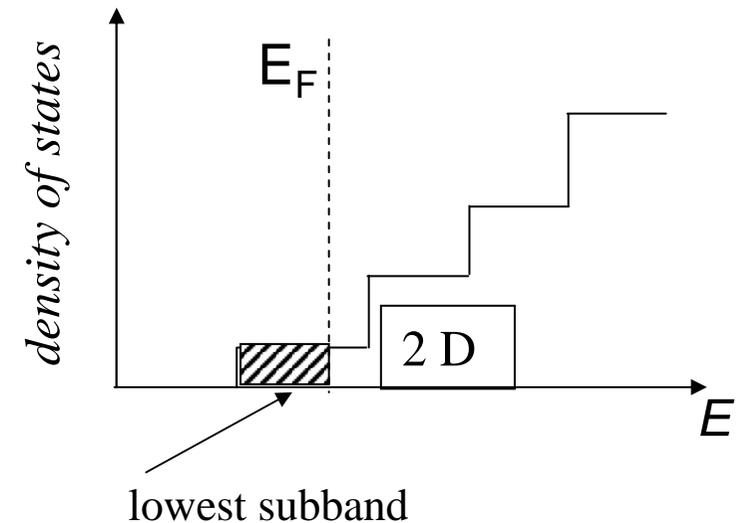
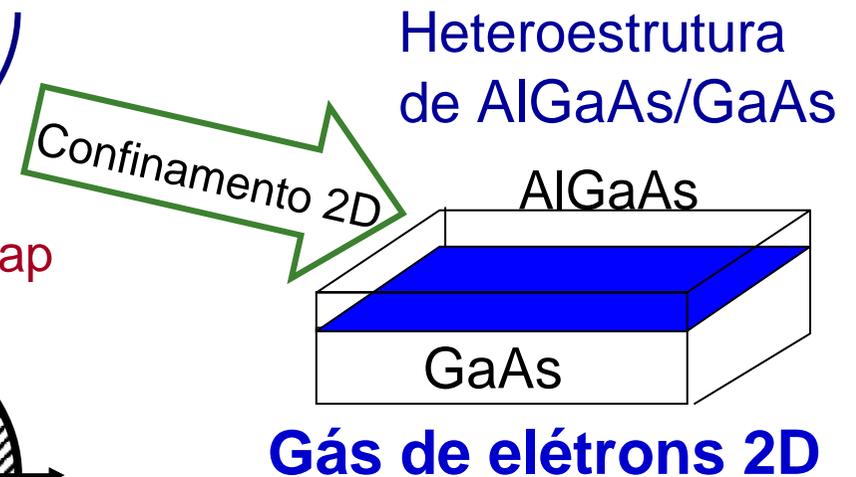
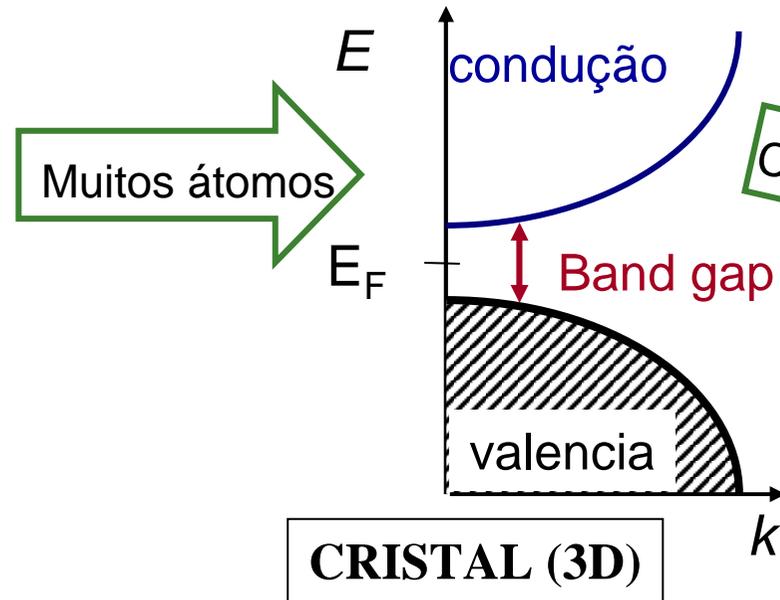
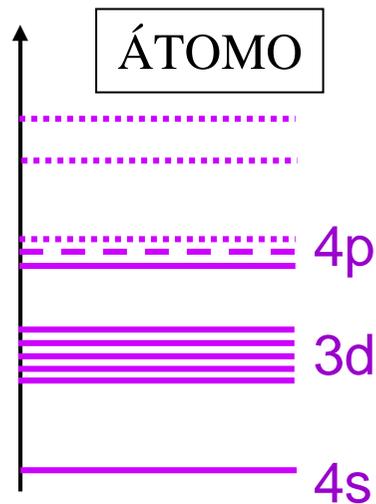
■ *Escala nanoscópica (quântica):*

- Comprimento:
 $\sim 10 - 100 \text{ nm} = 100-1000 \text{ \AA}$
- Energias típicas:
 $\Delta E \sim 0.1 - 1 \text{ meV} = 0.0001 \text{ Ry}$
- Temperatura:
 $1 \text{ meV}/k_B = 11.6 \text{ K}$

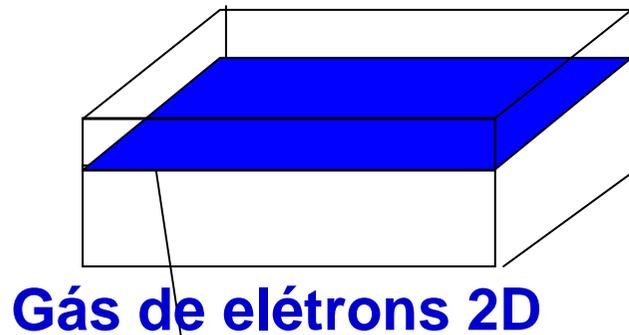
■ *Escala Macroscópica (clássica):*

- Comprimento:
 $\sim 1 \text{ mm} = 1\,000\,000 \text{ nm}$
- Energia (trabalho):
 $1 \text{ J} = \sim 6 \times 10^{18} \text{ eV}$
- Temperatura:
 $\sim 300 \text{ K} = 20 \text{ meV}/k_B$

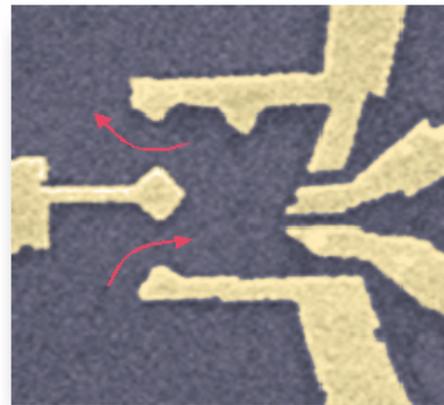
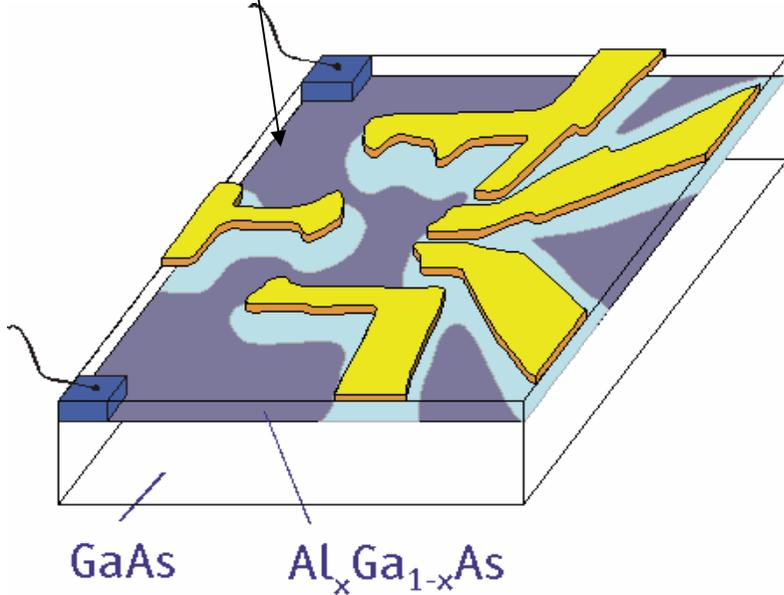
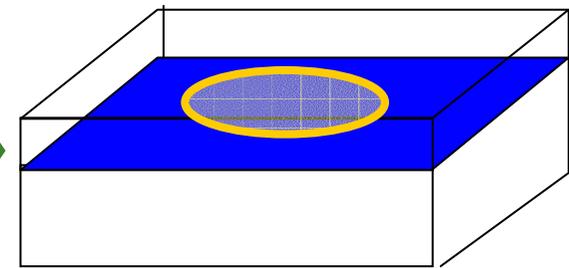
Receita para construir “átomos artificiais”.



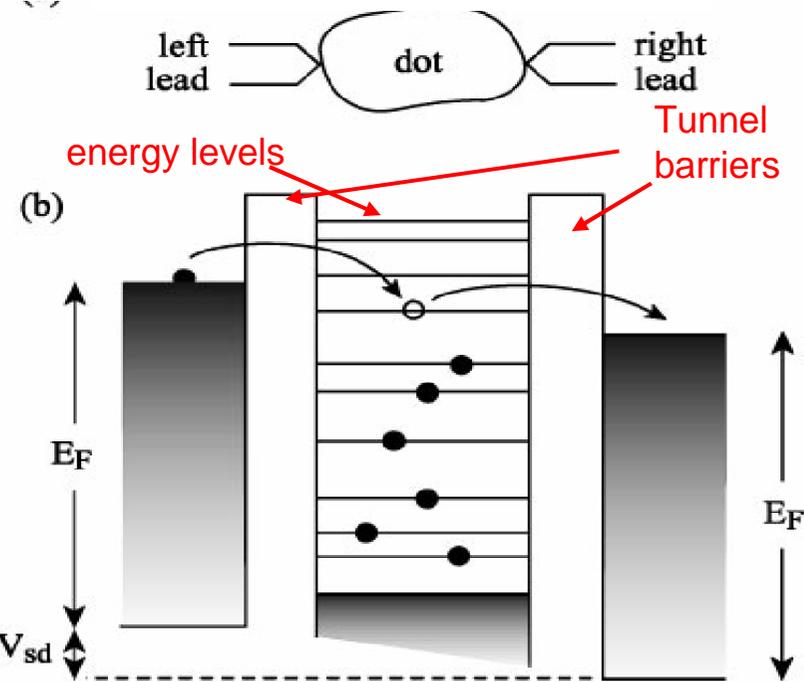
Receita para construir “átomos artificiais”.



Confine elétrons eletrostaticamente em uma região pequena (~nanometros).

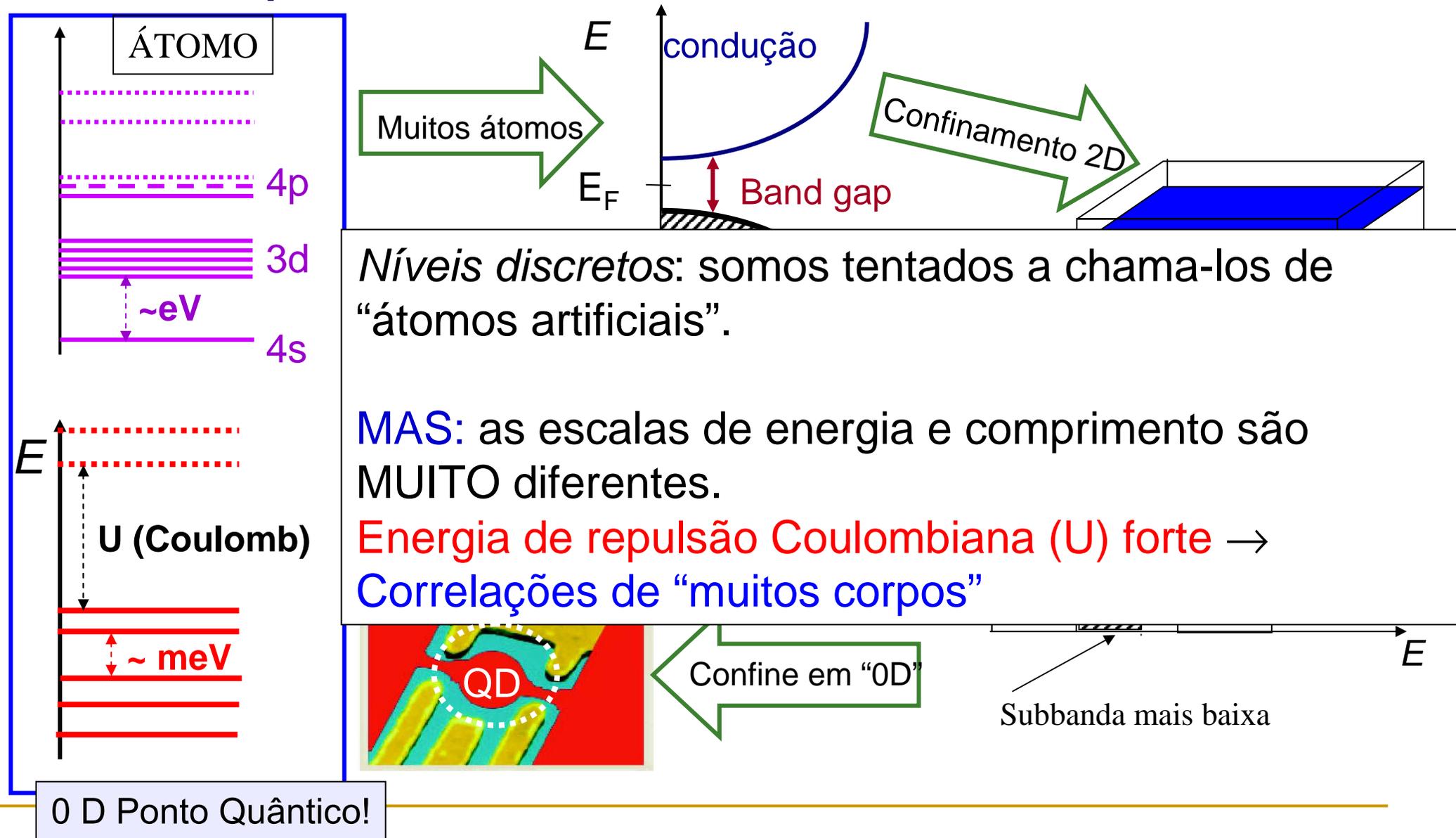


1 μm



from Charlie Marcus' Lab website (marcuslab.harvard.edu)

Receita para construir “átomos artificiais”.



Níveis discretos: somos tentados a chama-los de “átomos artificiais”.

MAS: as escalas de energia e comprimento são MUITO diferentes.

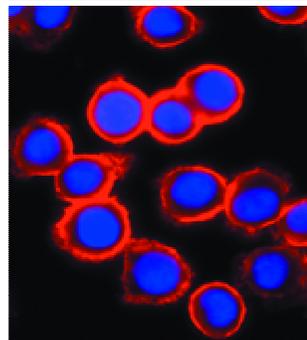
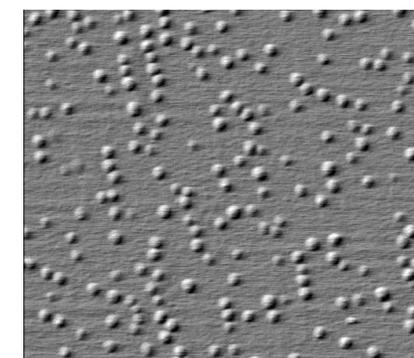
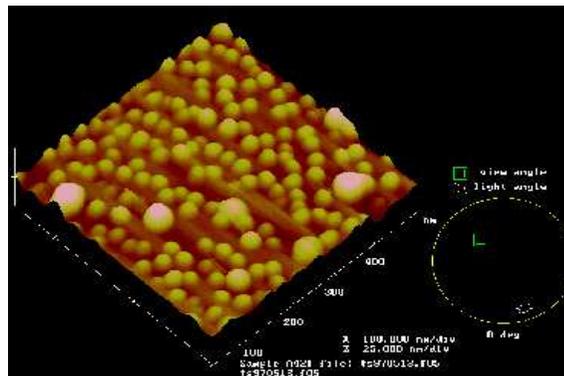
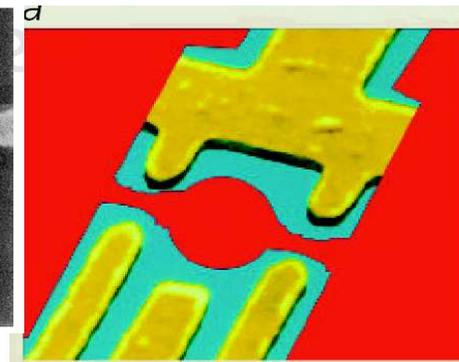
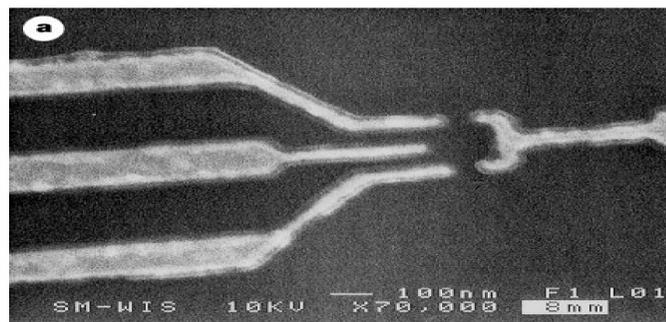
Energia de repulsão Coulombiana (U) forte →
Correlações de “muitos corpos”

0 D Ponto Quântico!

O que são *Pontos Quânticos*?

Pontos quânticos semicondutores:

- Dispositivos/cristais em que elétrons são **confinados** em dimensões da ordem de nm.
- Às vezes chamados de “átomos artificiais”.
- Vários tipos de “pontos quânticos”: **litográficos QDs**, auto-organizados, coloidais... Cada um com propriedades únicas.

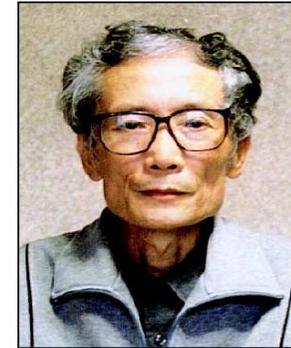


Exemplos de Física “fundamental” (no sentido de “Mais é diferente”) que podemos explorar em pontos quânticos:

- *Efeitos de correlação forte*: regimes onde a interação eletrônica é dominante em PQs.
- *Efeitos quânticos* (spin, tunelamento, níveis de energia, interferência) com controle.
- **Efeitos quânticos de muitos corpos**:
 - **Efeito Kondo**, transições de fase quânticas, estados de não-líquido de Fermi.

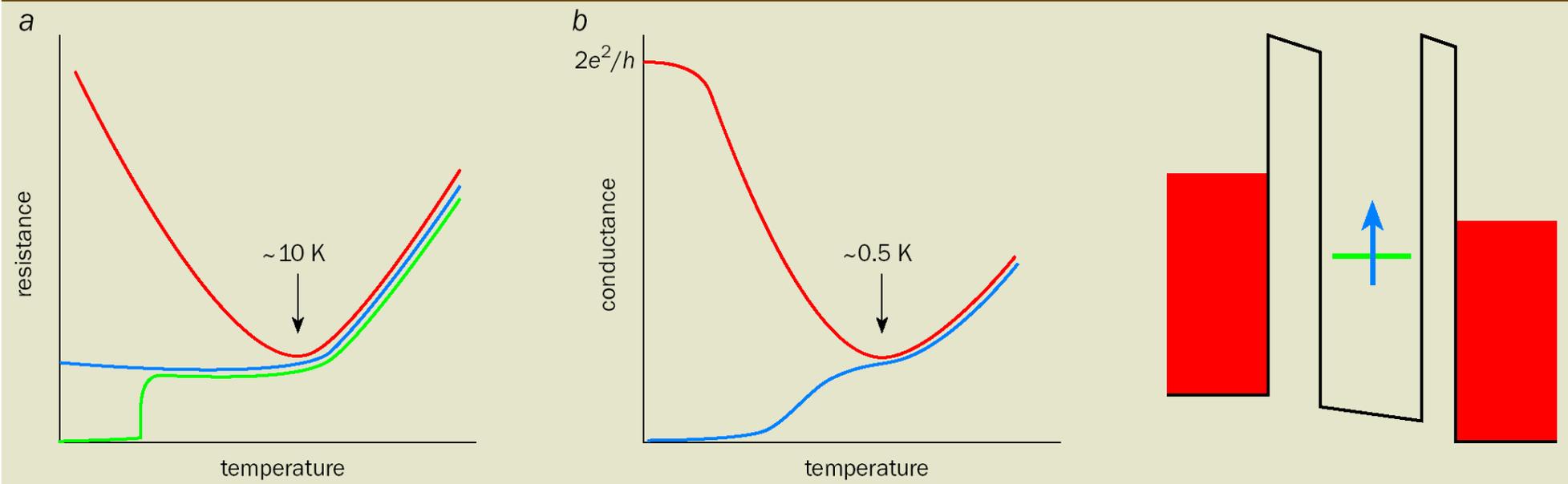
Efeito Kondo em Pontos Quânticos

Revival of the Kondo effect

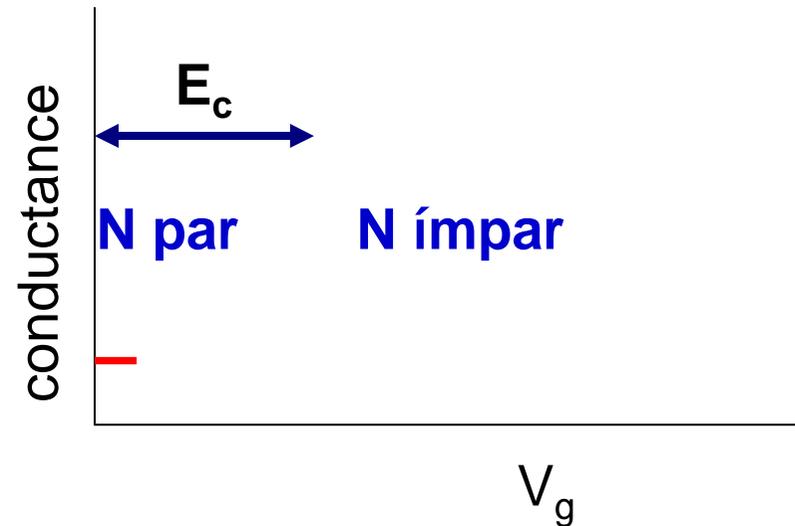
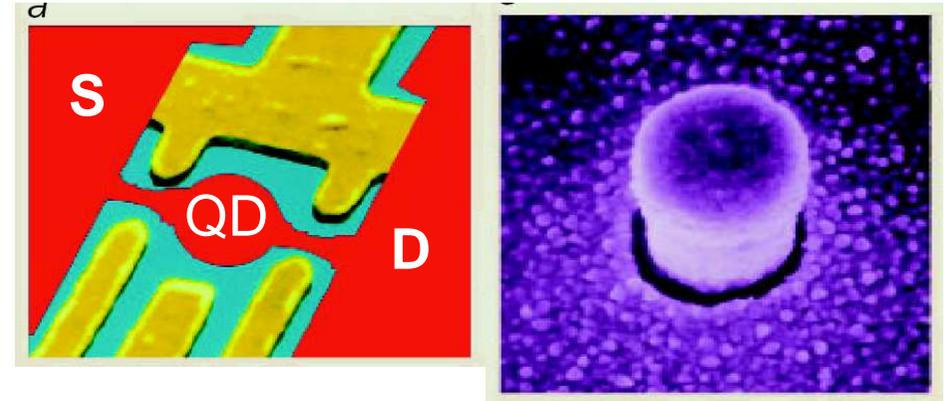
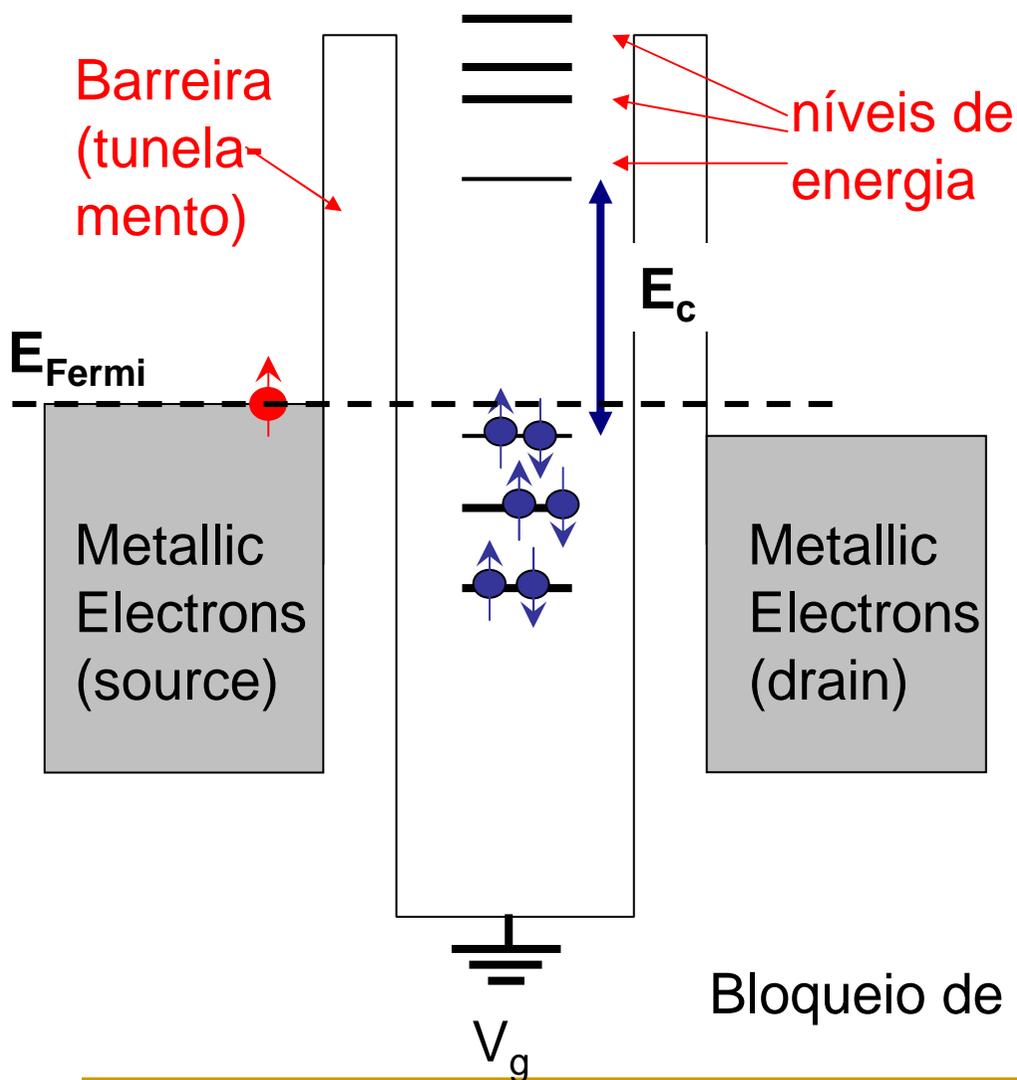


Leo Kouwenhoven and Leonid Glazman

1 The Kondo effect in metals and in quantum dots

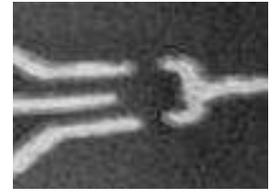
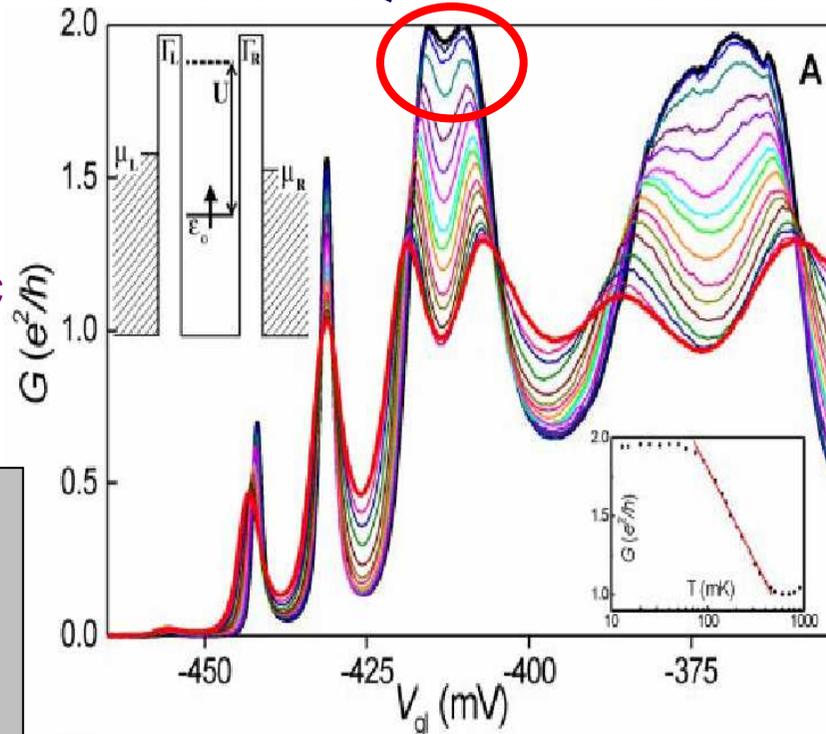
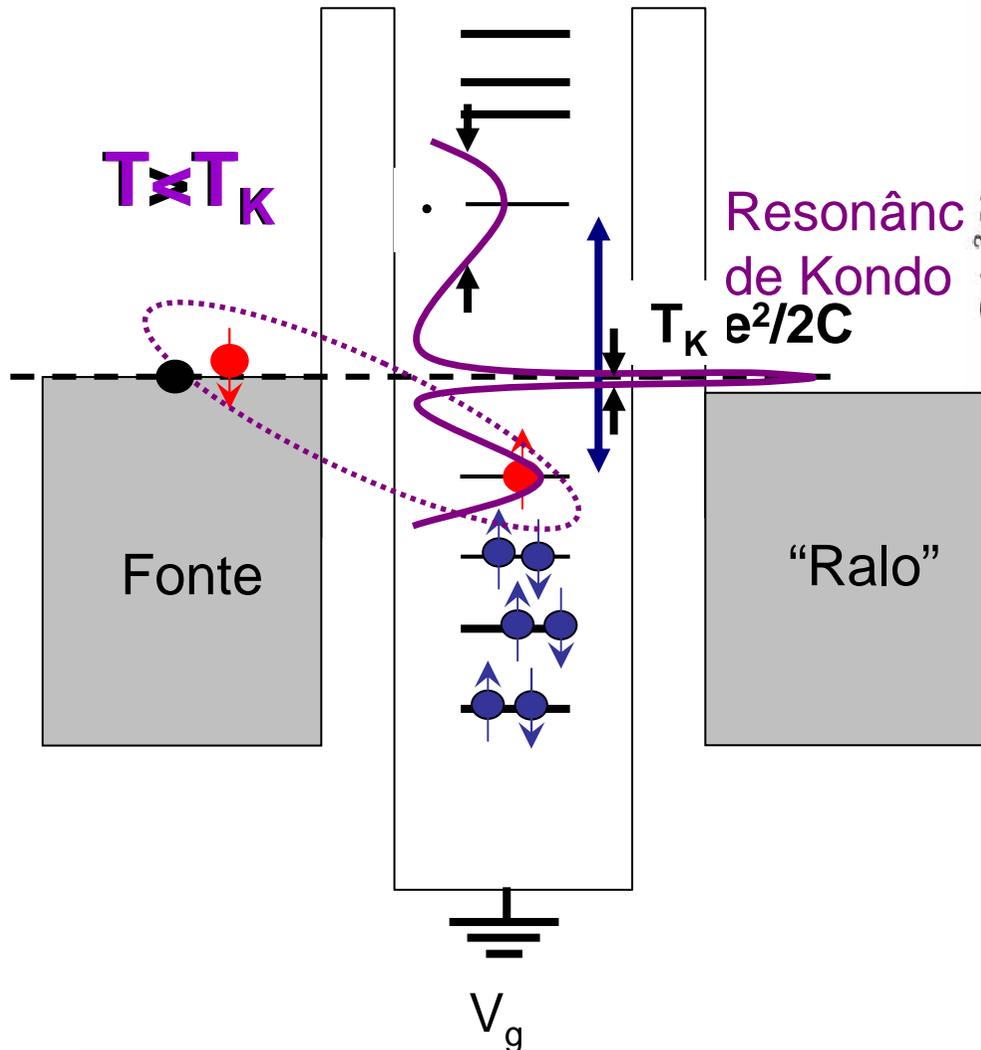


Bloqueio de Coulomb em Pontos Quânticos

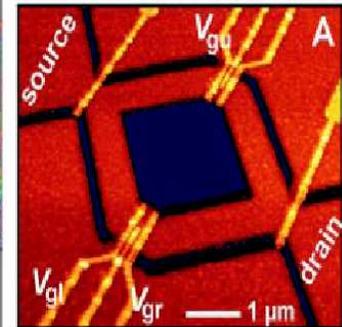


Bloqueio de Coulomb em Pontos Quânticos

Efeito Kondo em Pontos Quânticos



Goldhaber-Gordon et al
Nature **391** 156 (1998)

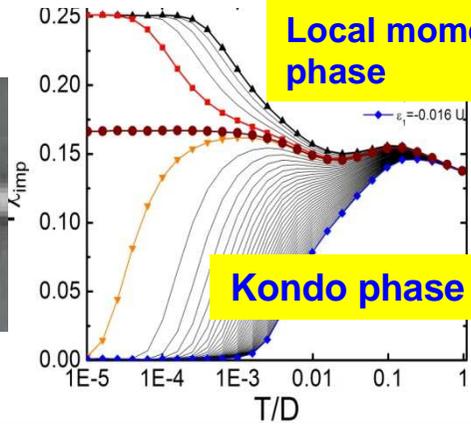
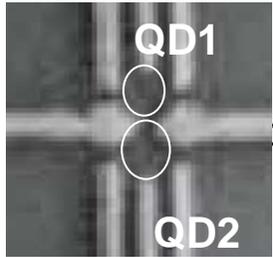


van der Wiel et al.,
Science **289** 2105
(2000).

- $T > T_K$: Bloqueio de Coulomb (G baixo)
- $T < T_K$: Formação do singlete de Kondo
- Resonância de Kondo em E_F (larg. T_K).
- Novo canal de condução em E_F :
Aumento de G ($\cdot 2e^2/h!$) a “zero-bias”

Kondo+NRG em nanoestruturas: exemplos

Pontos Quânticos semicondutores



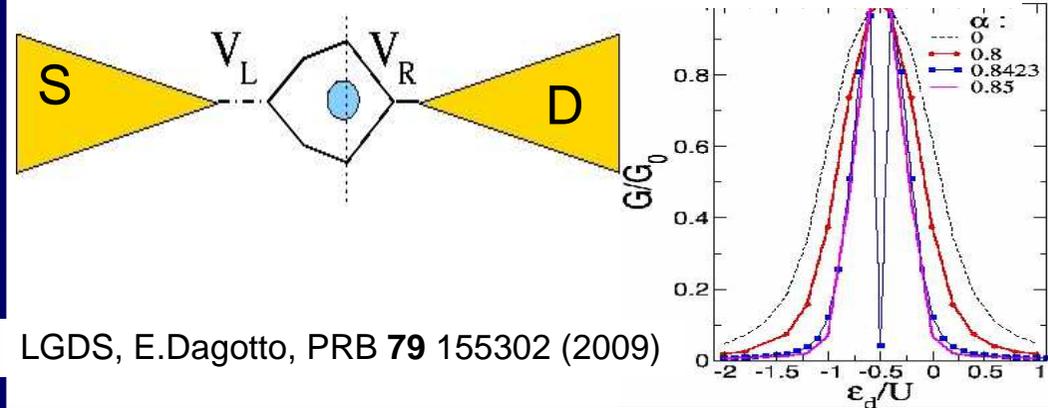
Local moment phase

Kondo phase

LGDS et al. PRL **97** 096603(2006);

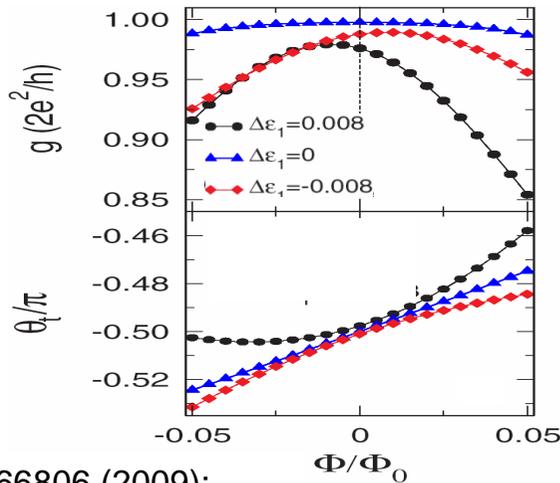
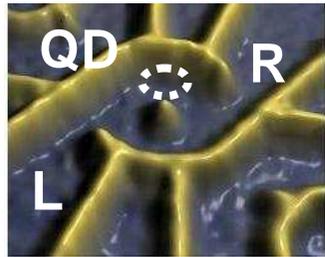
LGDS et al. PRB **78** 155304 (2008).

Junções moleculares c/ vibrações



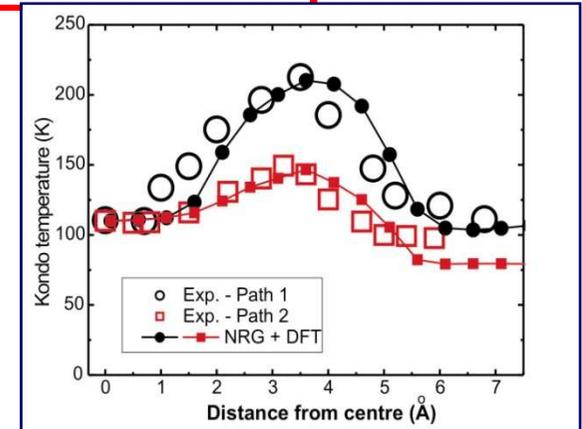
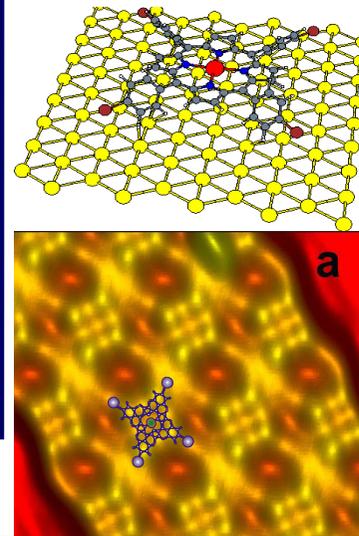
LGDS, E.Dagotto, PRB **79** 155302 (2009)

Anéis Quânticos + efeito Aharonov Bohm



LGDS et al. PRL **102** 166806 (2009);

Moléculas magnéticas em superfícies



LGDS et al. PRB **80** 155143 (2009)

Perera et al. PRL **105** 106601 (2010)

Projetos de Pesquisa: I.C., Mestrado e Doutorado

Teoria em Física da Matéria Condensada

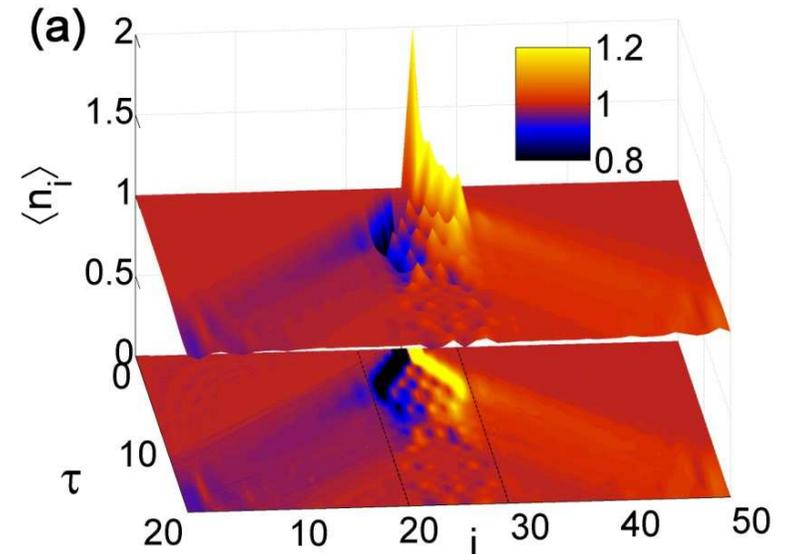
Prof. Luis Gregório Dias da Silva – DFMT

<http://www.fmt.if.usp.br/~luisdias> - luisdias@if.usp.br



Tópicos: - Transporte eletrônico e efeitos de correlação em diferentes sistemas (nanoestruturas semicondutoras, grafeno, isolantes topológicos).
- Métodos numéricos em sistemas fortemente correlacionados (NRG, DMRG).

Possibilidade de intercâmbio com grupos nos EUA para alunos de doutorado.



Perguntas? Dúvidas? Contate-me por e-mail (luisdias@if.usp.br) ou venha conversar diretamente comigo: Ed. Alessandro Volta, bl C sala 214

Curso de Pós-Graduação:

PGF5295 - Teoria Quântica de Muitos Corpos em Matéria Condensada.

Prof. Luis Gregório Dias da Silva – FMT

(1o. Semestre de 2013: 3as e 5as 10h-12h)



Obrigado pela atenção!