

# *Usando Fortran, C e MatLab em Física da matéria condensada teórica.*

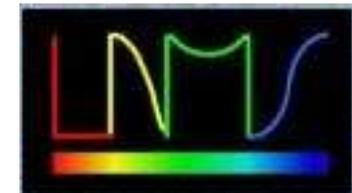
Prof. Luis Gregório Dias da Silva

*Lab. de Novos Materiais Semicondutores – LNMS*

*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



---

# O que faz um Físico teórico em Matéria Condensada (“Estado Sólido”)?

- Estudamos o comportamento de **elétrons em sistemas de muitos átomos**.
- Tipicamente, tais sistemas são “sólidos” embora essa terminologia não se aplique a todos os sistemas que estudamos (por ex. condensados de Bose-Einstein, materiais nanoestruturados).
- Hoje em dia, salvo raras exceções, o trabalho de um Físico teórico de Matéria Condensada envolve algum tipo de cálculo computacional.
- Na maioria dos casos, cálculos podem ser feitos em Desktops ou “clusters” computacionais pequenos.
- Em alguns casos, programação em sistemas de alto desempenho (clusters com centenas de nodos) são necessários.

# A mensagem: “Mais é Diferente!”



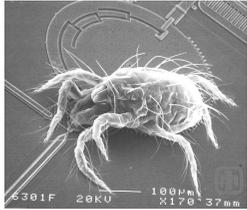
“ O comportamento de grandes e complexos agregados de partículas elementares não pode ser entendido em termos de uma simples extrapolação das propriedades de algumas poucas partículas.

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)

# “A escala das coisas” (US DOE-BES)

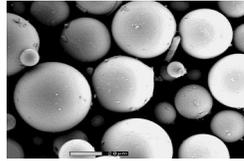
## Things Natural



Dust mite  
200 μm



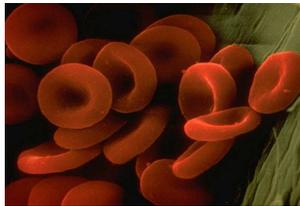
Ant  
~ 5 mm



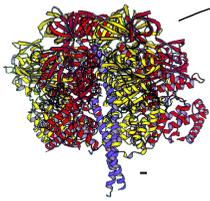
Fly ash  
~ 10-20 μm



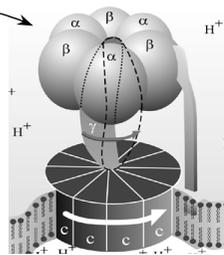
Human hair  
~ 60-120 μm wide



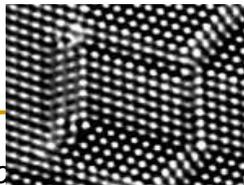
Red blood cells  
(~7-8 μm)



~10 nm diameter

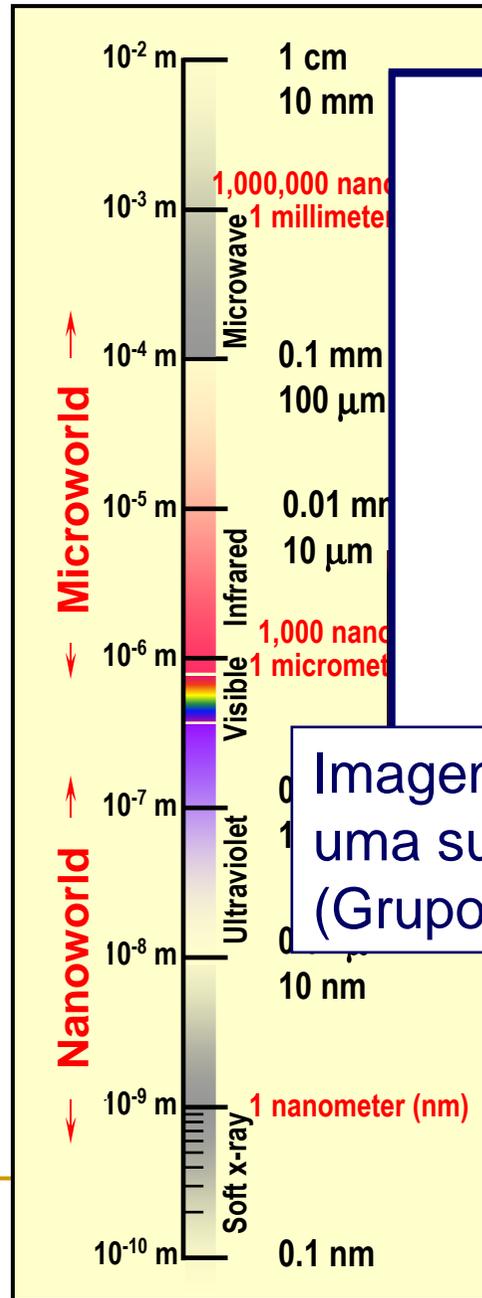


ATP synthase



Atoms of silicon  
spacing ~tenths of nm

## Things Manmade

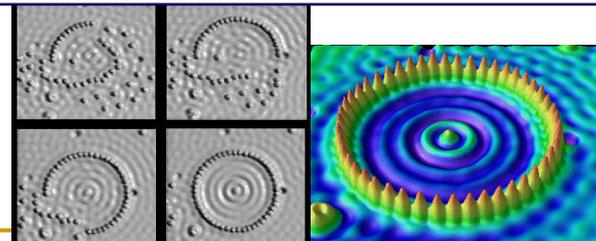


“NanoSmiley”



36 nm

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



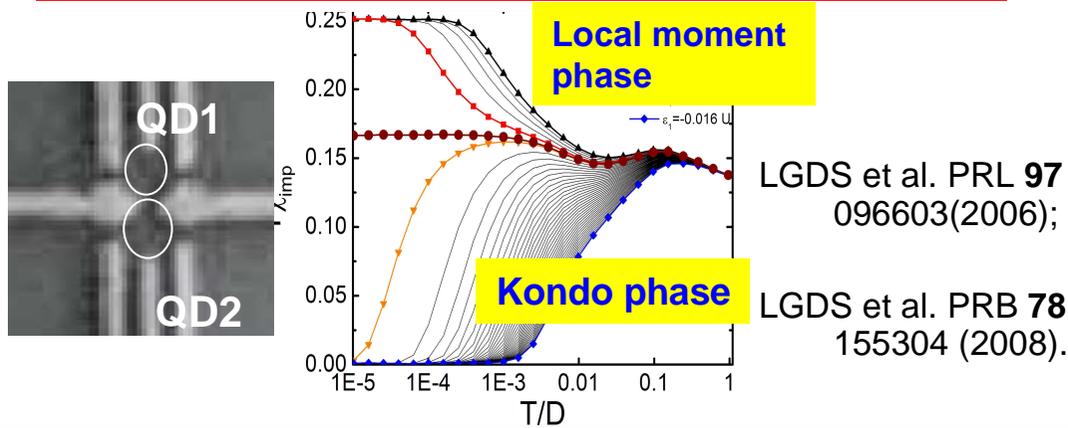
Quantum corral of 48 iron atoms on Cu surface  
positioned one at a time with an STM tip  
Corral diameter 14 nm



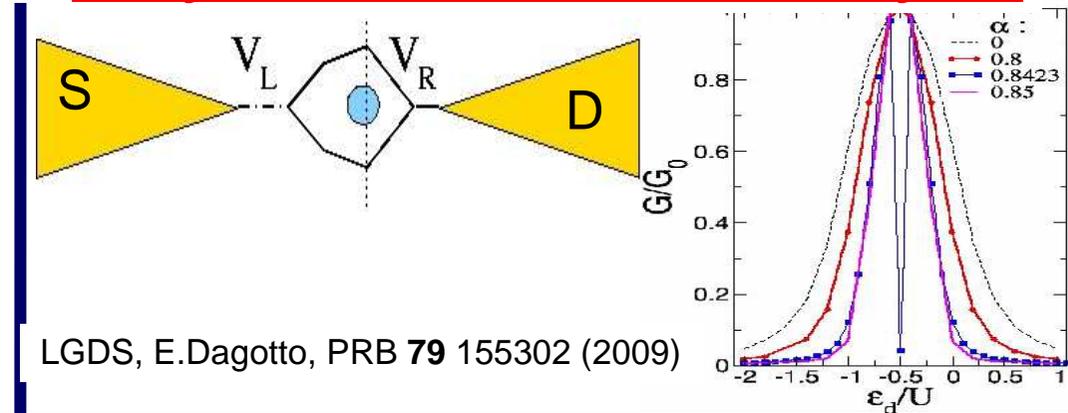
Carbon nanotube  
~1.3 nm diameter

# Meu trabalho: efeitos de interação em nanoestruturas

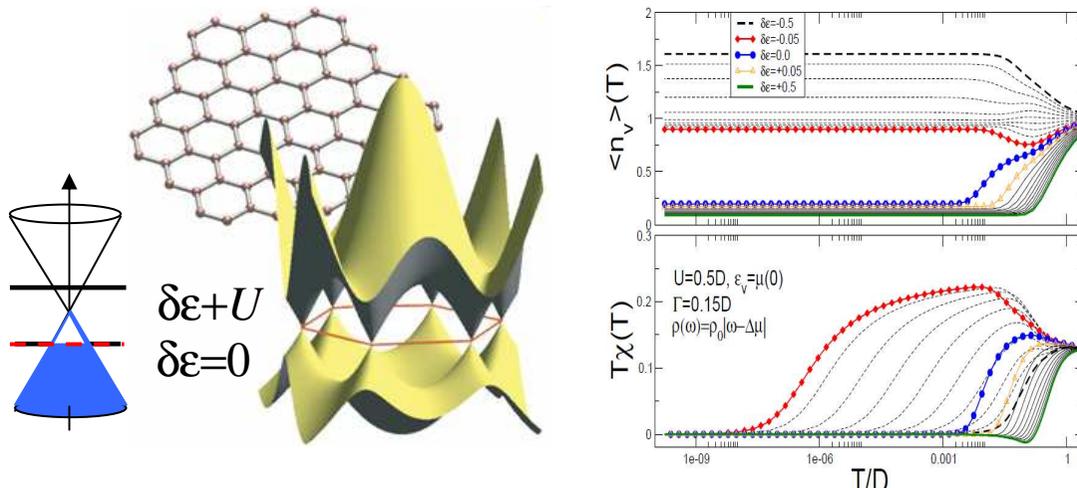
## Pontos Quânticos semicondutores



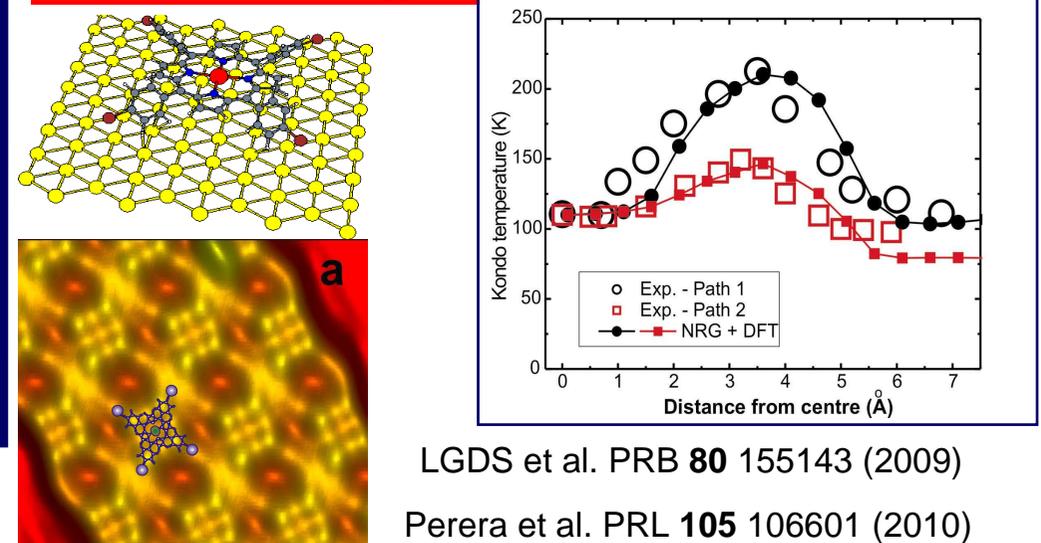
## Junções moleculares c/ vibrações



## Efeito Kondo em Grafeno desordenado



## Moléculas magnéticas em superfícies



# A mensagem: “Mais é Diferente!”



“ 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 ~~independentes~~ não interagentes

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

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

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

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

(via diagonalização...)

Sistema de Muitos Corpos

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

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

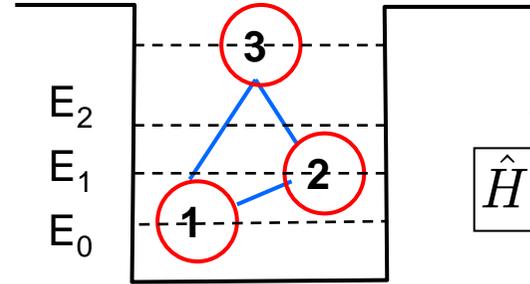
$$E_0 = ?$$

$$E_k = ?$$

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

Mesmo nos casos mais simples, em geral, **não há** solução analítica!  
(salvo raras exceções)

→ Soluções numéricas são mais a regra do que a exceção.



# O que você vai *aprender* como aluno de I.C. em Física Matéria Condensada teórica?

- **Física:** Mecânica Quântica, Estado Sólido, Física Estatística, Métodos Matemáticos, Métodos Numéricos...
- **Computação:**
  - Usar o sistema operacional Linux: mesmo que algumas aplicações sejam em Windows, Linux é o padrão para cálculos em Física.
  - Aprender uma (ou mais) linguagens de programação (Tipicamente Fortran ou C. Se já souber alguma das duas, podemos pensar em C++).
  - Linguagens “script” como Perl, Python, ferramentas como MatLab ou Mathematica.
  - Aprender a usar programas gráficos e escrever em Latex: O resultado final do seu trabalho será sempre expresso por gráficos e equações.

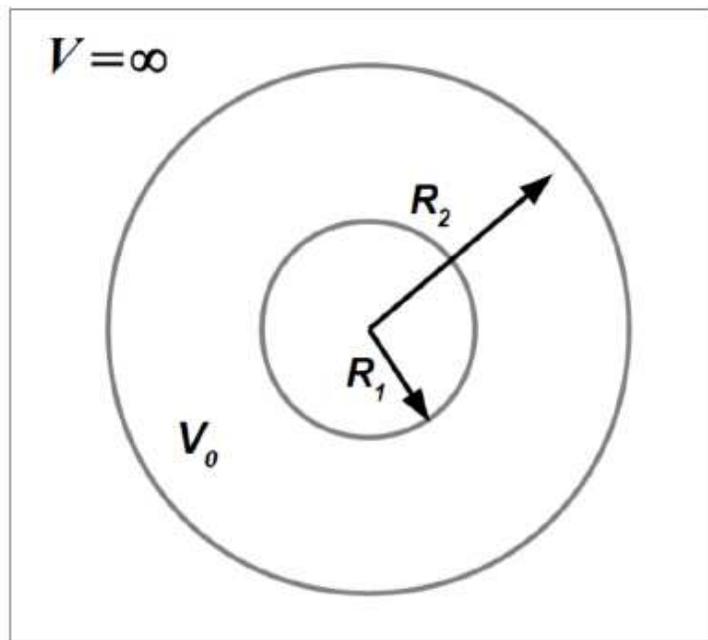
# Que tipo de trabalho faz um aluno de I.C. em Física Matéria Condensada teórica?

- **Iniciantes** (até o 2o ano):
  - Se familiarizar com linguagens de programação, Linux, ferramentas como Mathematica e MatLab, etc.
- **A partir do 2º ano** (já tendo feito ou fazendo Cálculo Numérico e Algebra Linear):
  - Estudar conceitos básicos de Mecânica Quântica, teoria de Estado Sólido e Mecânica Estatística.
  - Projetos envolvendo aplicação de métodos numéricos.
- **3º e 4º anos** (Já tendo feito Mecânica Quântica, Estado Sólido Física Estatística)
  - Projetos mais próximos ao “mundo real” da pesquisa, já visando um mestrado e publicações.

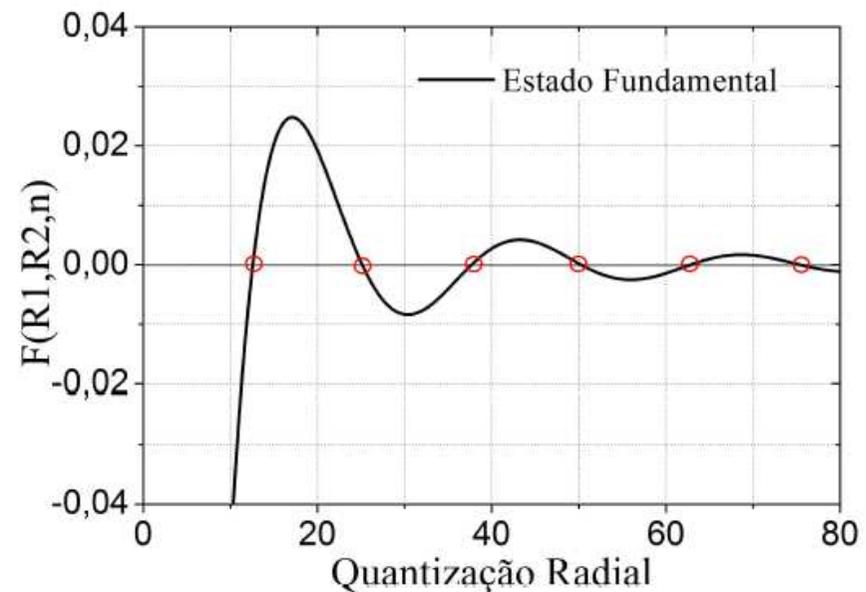
# Um exemplo recente:

- Projeto de IC: Dimy Sanches
- “Estados quânticos de partícula única em anéis nanoscópicos.” (PIBIC 2011)

$$E\psi(r, \theta) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, \theta) + V_0 \psi(r, \theta)$$



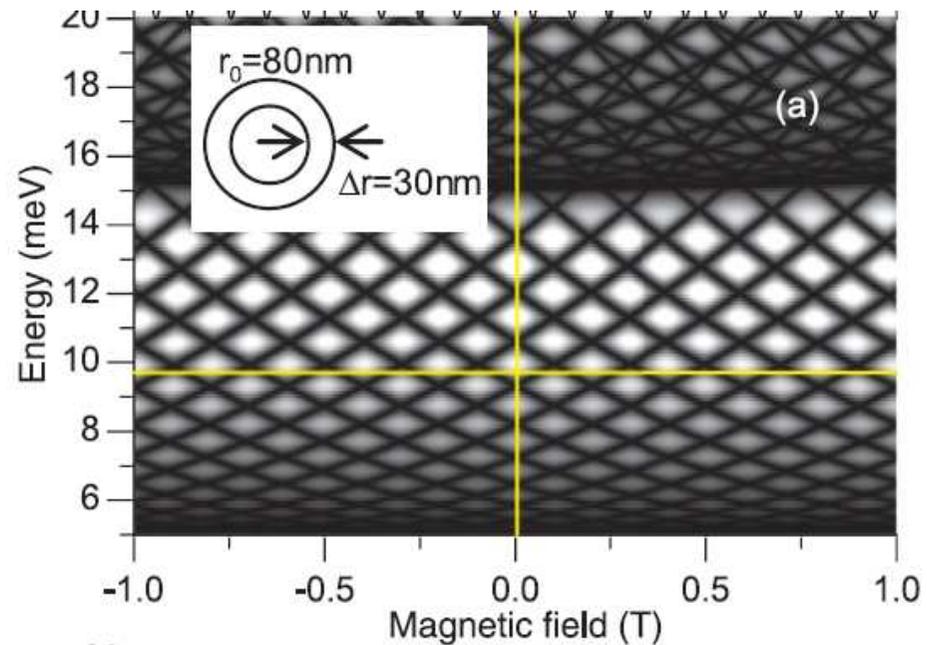
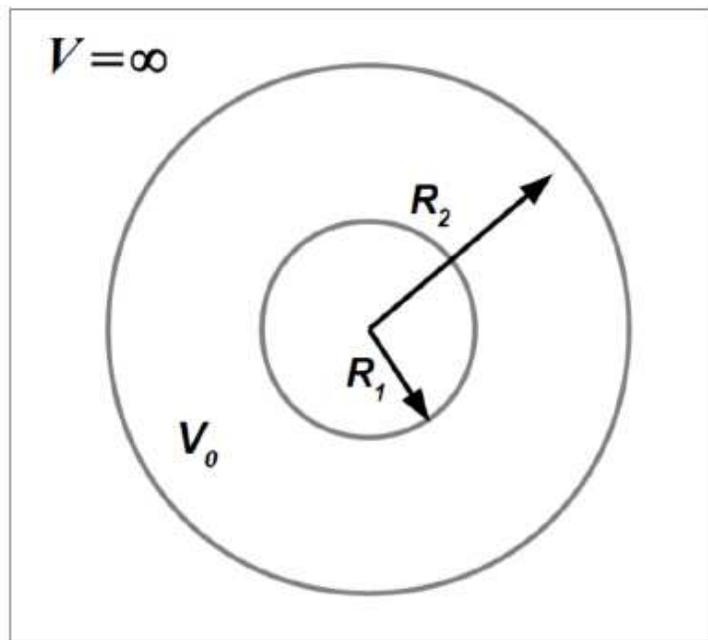
$$F(k, n) = N_n(kR_1)J_n(kR_2) - N_n(kR_2)J_n(kR_1)$$



# Um exemplo recente:

- Projeto de IC: Dimy Sanches
- Aplicação prática: experimento realizado no grupo LNMS) pelos profs. Félix Hernandez e Gennady Gusev

$$E\psi(r, \theta) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, \theta) + V_0 \psi(r, \theta)$$



F.G.G. Hernandez, G.M. Gusev, J.D. Kvon. J.C. Portal, PRB **84** 075332 (2011)

---

# Alguns projetos de IC (exemplos):

- **Iniciantes** (até o 2o ano):
  - Aplicação de MatLab como ferramenta para visualizar dinâmica de excitações em sistemas correlacionados (“filmes”).
- **A partir do 2º ano** (já tendo feito ou fazendo Cálculo Numérico e Algebra Linear):
  - Cálculo de níveis de energia em Nanoestruturas.
  - Modelos simples de transporte eletrônico/propriedades ópticas
- **3º e 4º anos** (Já tendo feito Mecânica Quântica, Estado Sólido Física Estatística)
  - Cálculo de propriedades termodinâmicas em sistemas Kondo.
  - Modelos de transporte eletrônico em nanoestruturas/sistemas de baixa dimensionalidade.

# Como é o dia-a-dia da pesquisa?

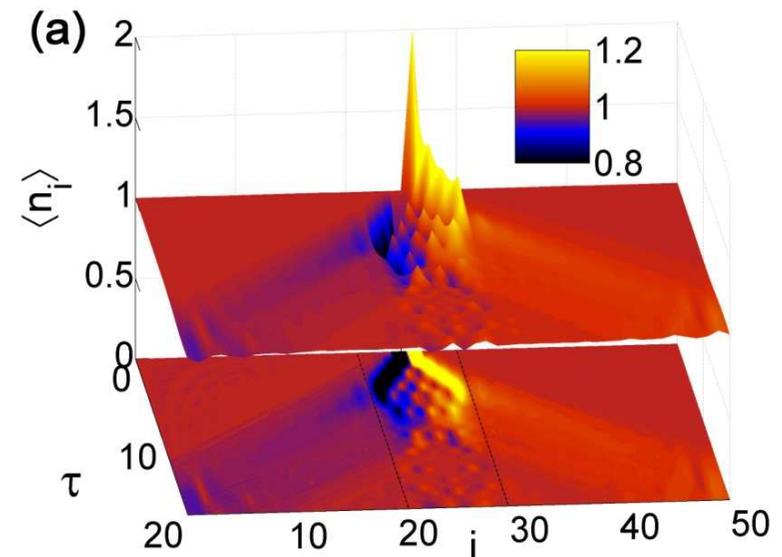
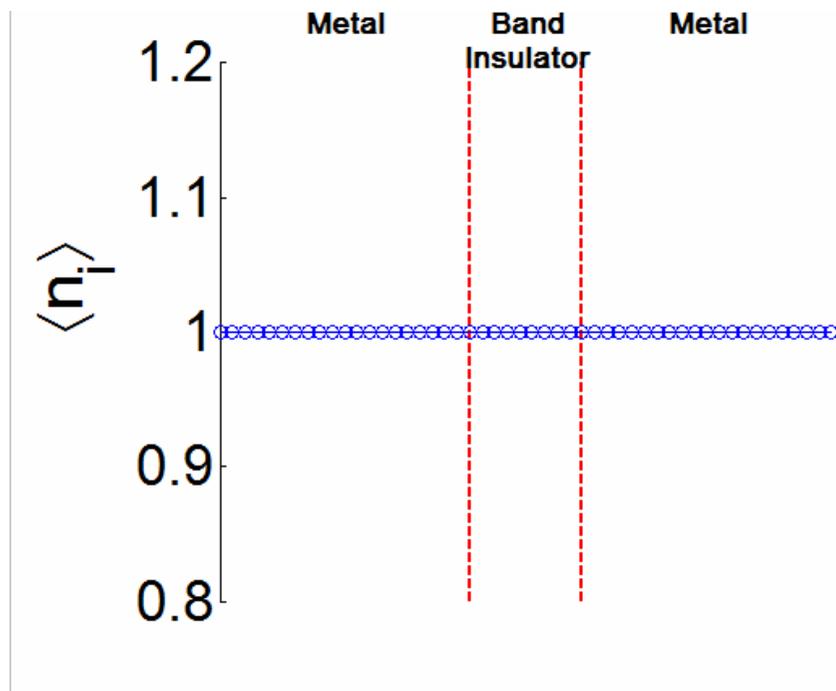
## Linguagens de Programação usadas:

- **Fortran** (a preferida dos Físicos) – f77, f90,...
- C (hoje é o “padrão” de sintaxe).
- **C++** (orientada a objeto, muito usada no mundo, em franca ascensão entre os Físicos).
- **Perl** e **BASH** (em “script”): facilitam enormemente sua vida em sistemas Linux)
- Python (bastante prática; vocês verão em cálculo numérico)
- Obs: conhecimento de outras linguagens (Java, C#, etc.) pode ser útil mas estas são pouco usadas em Física.

# Como é o dia-a-dia da pesquisa?

## Outras ferramentas úteis:

- **Mathematica** (da Wolfram. Muito útil para coisas rápidas, alguns usam de forma mais intensa)
- **MatLab** (extremamente poderosa, muito usada em ciências e produz gráficos excelentes).

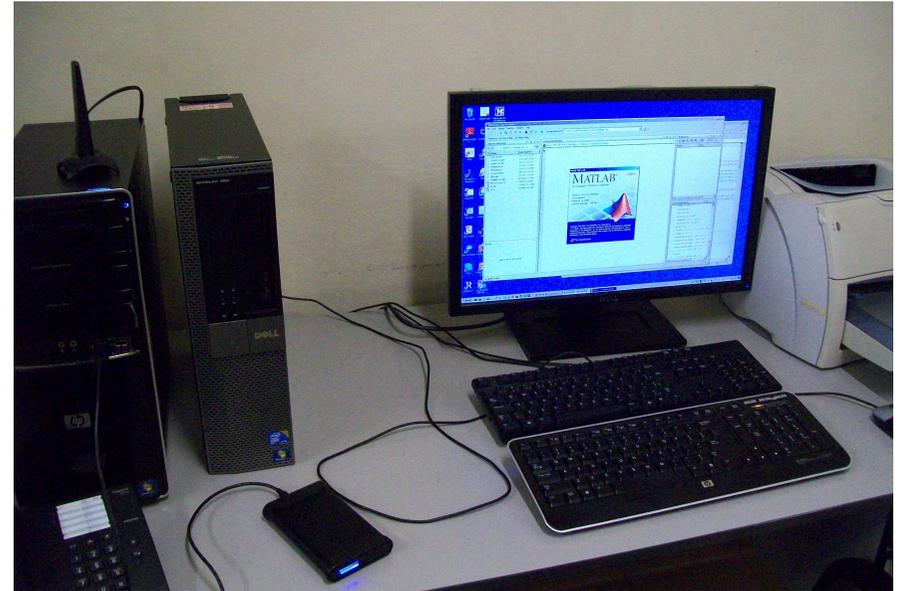


# Como é o dia-a-dia da pesquisa?

## Onde são feitos os cálculos?



Cluster “wilson”: Servidores Dell R410  
8 processadores Xeon quad-core (32 núcleos)  
Acesso remoto. Cálculo “pesado” (programas em C++, Fortran)  
com tempo de processamento de vários minutos ou horas (dias?)

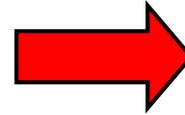


Desktops (ou Laptops):  
Programação em si, testes;  
MatLab, Mathematica; graficos, textos

# Exemplo típico:

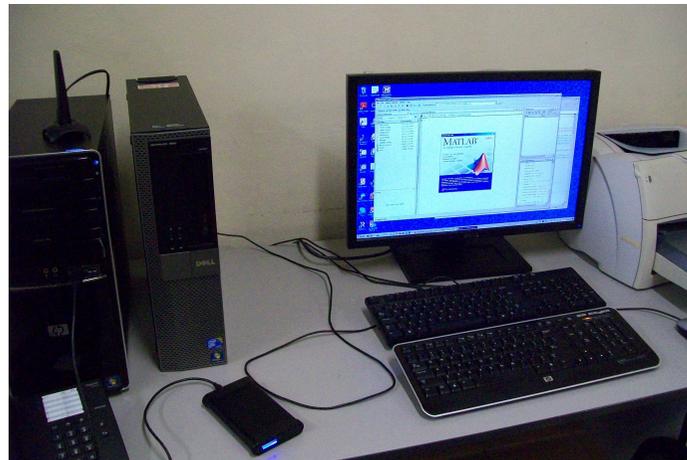
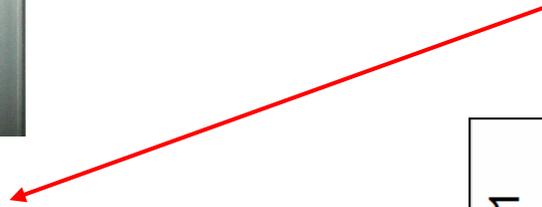


Código em C++

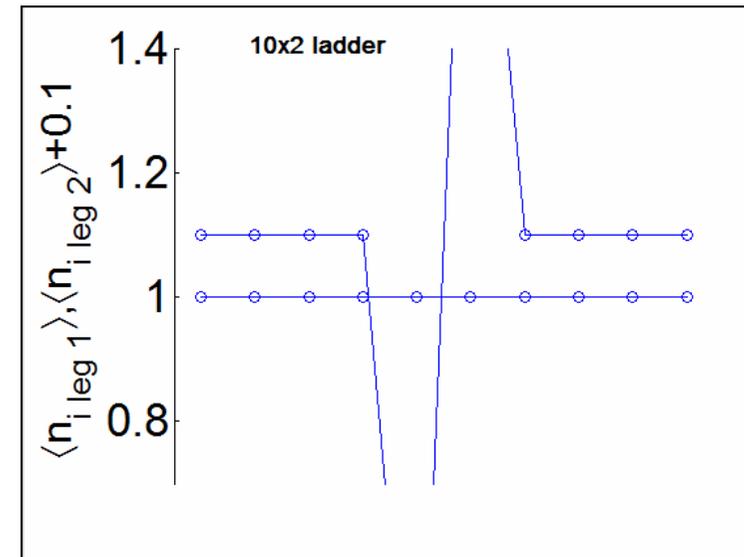
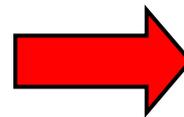


Arquivo de dados

```
1 0 1 1
2 0 2 1
3 0 3 1
4 0 4 1
5 0 5 1
6 0 6 0.999992568536671
7 0 7 0.999992568536671
8 0 8 0.999977705610012
9 0 9 3.20667642665517e-05
10 0 10 1.00000743146333
11 0 11 1.99991825390338
12 0 12 0.999947979756694
13 0 13 0.999955411220023
```



MatLab



# Meus colaboradores:



Fabian Heidrich-Meisner (München)

Adrian Feiguin (UW)

Sergio Ulloa  
Nancy Sandler  
Saw Hla (Ohio U.)

Elbio Dagotto (Oak Ridge, U. Tennessee)  
Gonzalo Alvarez (ORNL)

Kevin Ingersent (UF)

Edson Vernek (UFU - Brazil)

Caio Lewenkopf (UFF, Brazil)

Gennady Gusev (LNMS, USP)  
Félix Hernandez (LNMS, USP)

*Suporte financeiro (Brasil):* CNPq,  
FAPESP, PRP-USP



*Suporte (USA):*

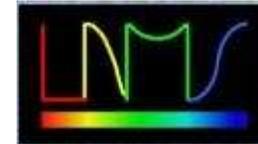


# Projetos de Pesquisa: I.C., Mestrado e Doutorado

## Teoria em Física da Matéria Condensada

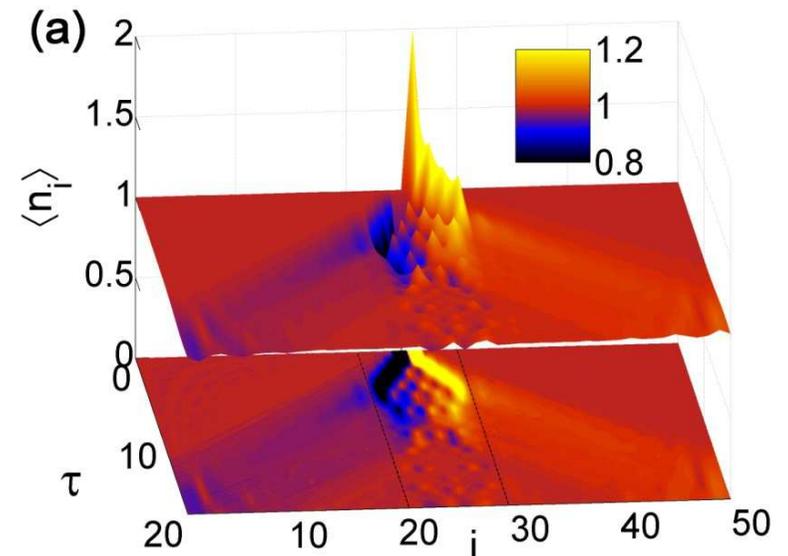
Prof. Luis Gregório Dias da Silva – LNMS - FMT

<http://www.fmt.if.usp.br/~luisdias> - [luisdias@if.usp.br](mailto: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](mailto:luisdias@if.usp.br)) ou venha conversar diretamente comigo: Ed. Mário Schemberg, sala 209