

PGF5110 - Física do Estado Sólido I

2as e 4as – 10h-12h.
Sala 210 – Ala Central

Prof. Luis Gregório Dias da Silva
Depto. Física Materiais e Mecânica – IF – USP
Ed. Alessandro Volta, bloco C, sala 214
luisdias@if.usp.br

Página do curso ([Minha web-page -> Ensino -> Estado Sólido 2017](#))
<http://www.fmt.if.usp.br/~luisdias/Teaching/PosGrad/EstadoSolido2017/>

Uma pergunta básica:

“Qual é a resposta para a Vida, o Universo e TUDO mais?”

Resposta (Google?):

42

“O Guia do Mochileiro das Galáxias” de Douglas Adams

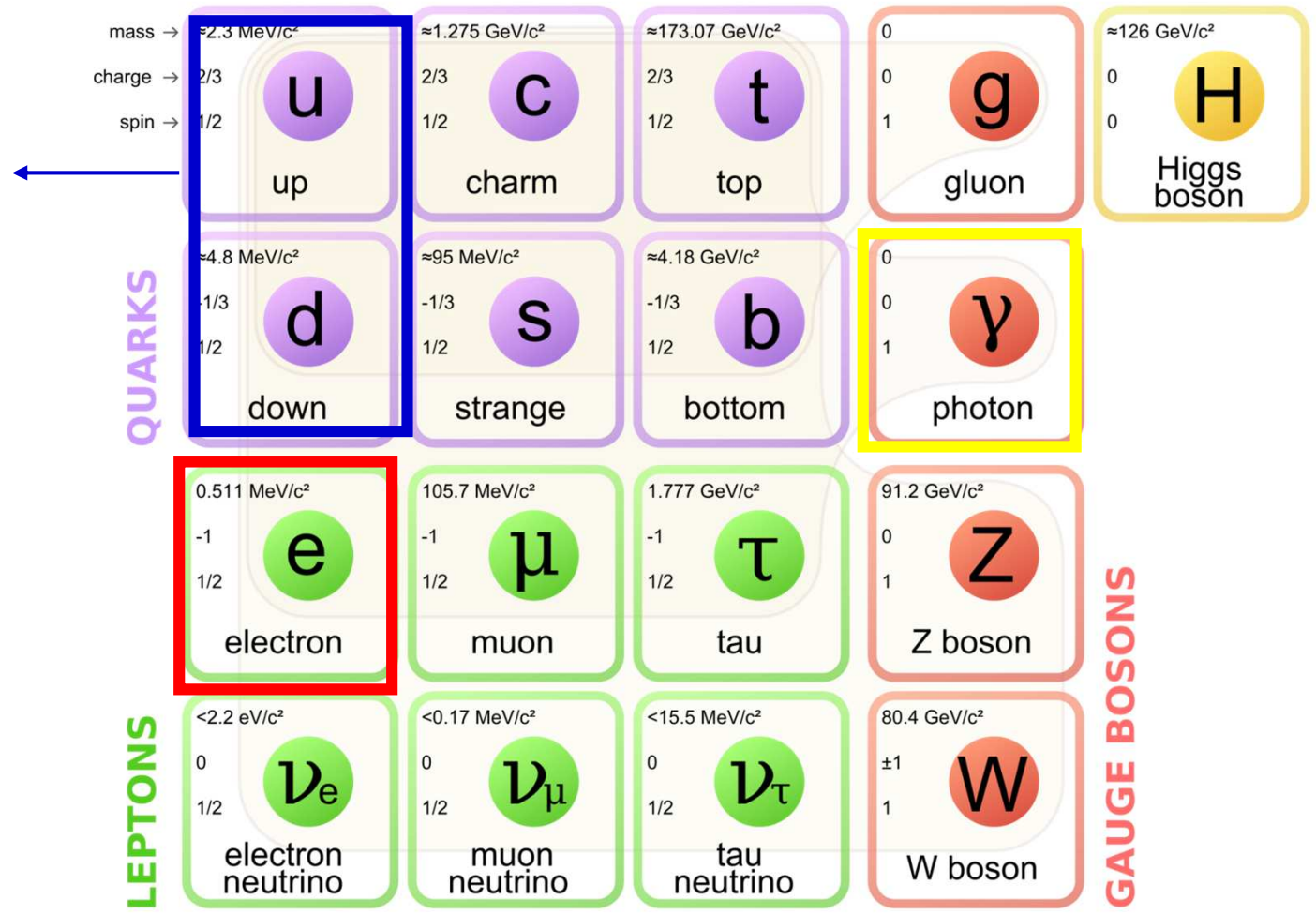
Em Física dos Materiais, a pergunta é expressa pela Eq. de Schrödinger:

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

O que constitui esse “tudo”?

Núcleos

Elétrons + núcleos + fótons
são suficientes para
descrever *todos* os
materiais do nosso dia-
a-dia!



Partículas do Modelo Padrão

“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!*

Na verdade, “Mais é Diferente!”



Phil Anderson – Princeton
Prêmio Nobel – 1977



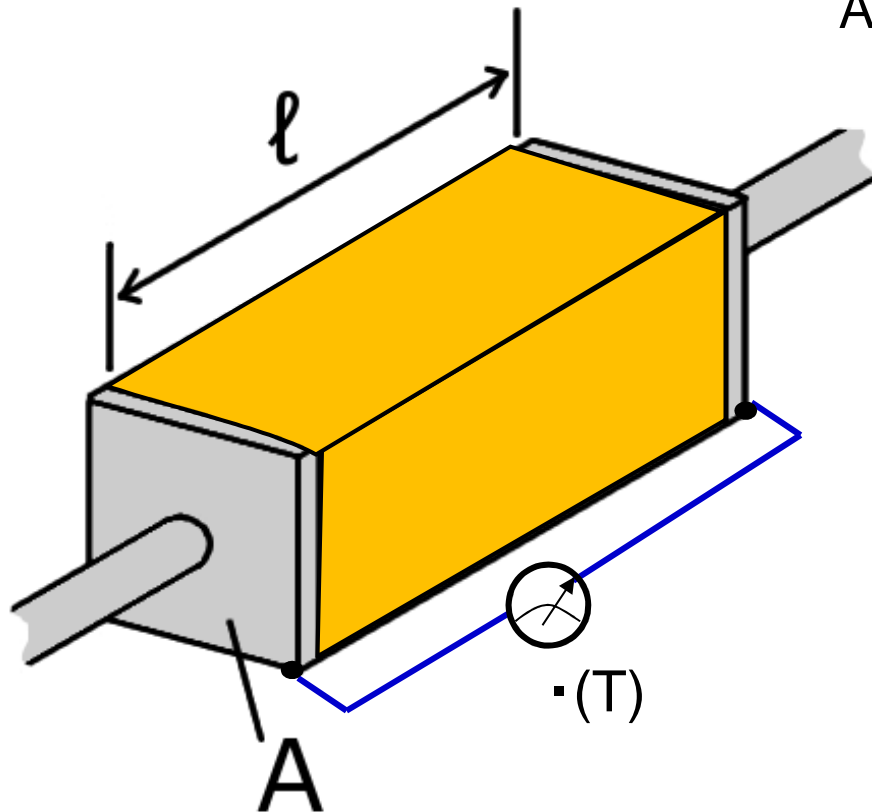
1977

“ 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.”

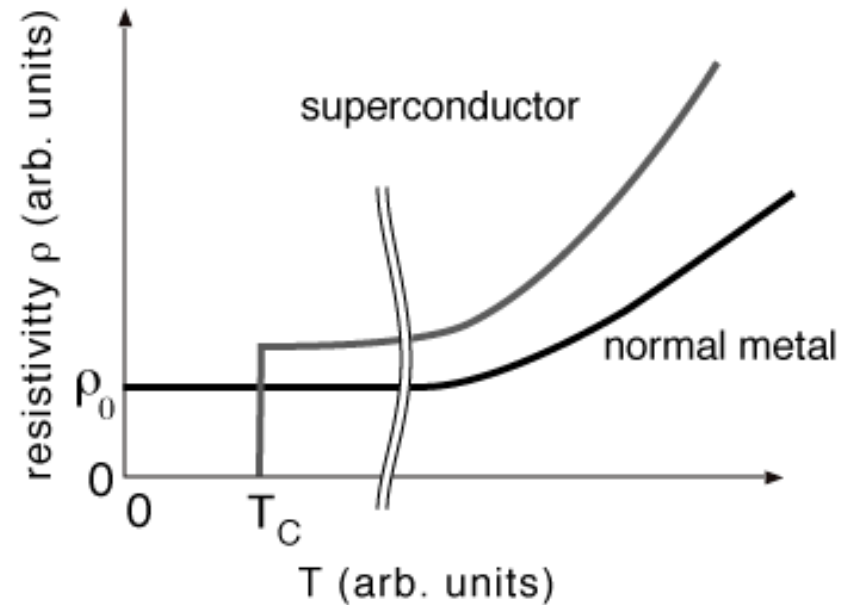
Phillip W. Anderson, “More is different”,
Science **177** 393 (1972)

Exemplo: Supercondutividade.



$$\rho = R \frac{A}{l}$$

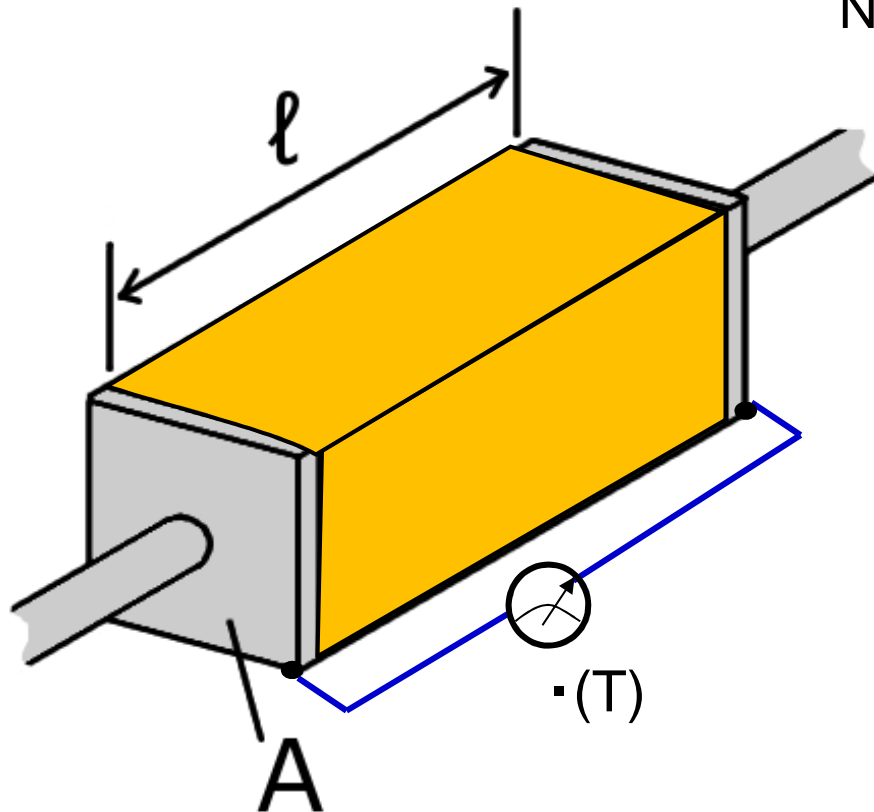
A resistividade de um metal diminui à medida que a temperatura diminui.



<http://users-phys.au.dk/philip/pictures/physicsfigures/node12.html>

Em um material **supercondutor**, a resistividade é zero abaixo de uma determinada temperatura. Neste caso, ele se transforma em um *condutor perfeito* e transmite energia sem perdas.

Exemplo: Supercondutividade.

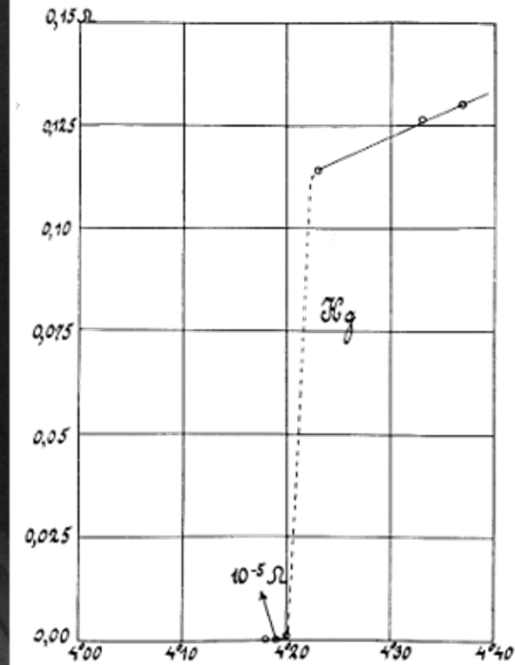


$$\rho = R \frac{A}{l}$$

No caso de mercúrio, por exemplo, a resistividade vai a zero abaixo de 4.2 Kelvin.

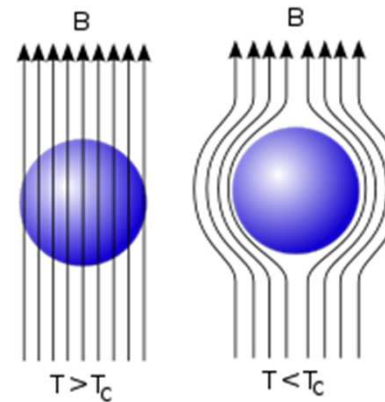
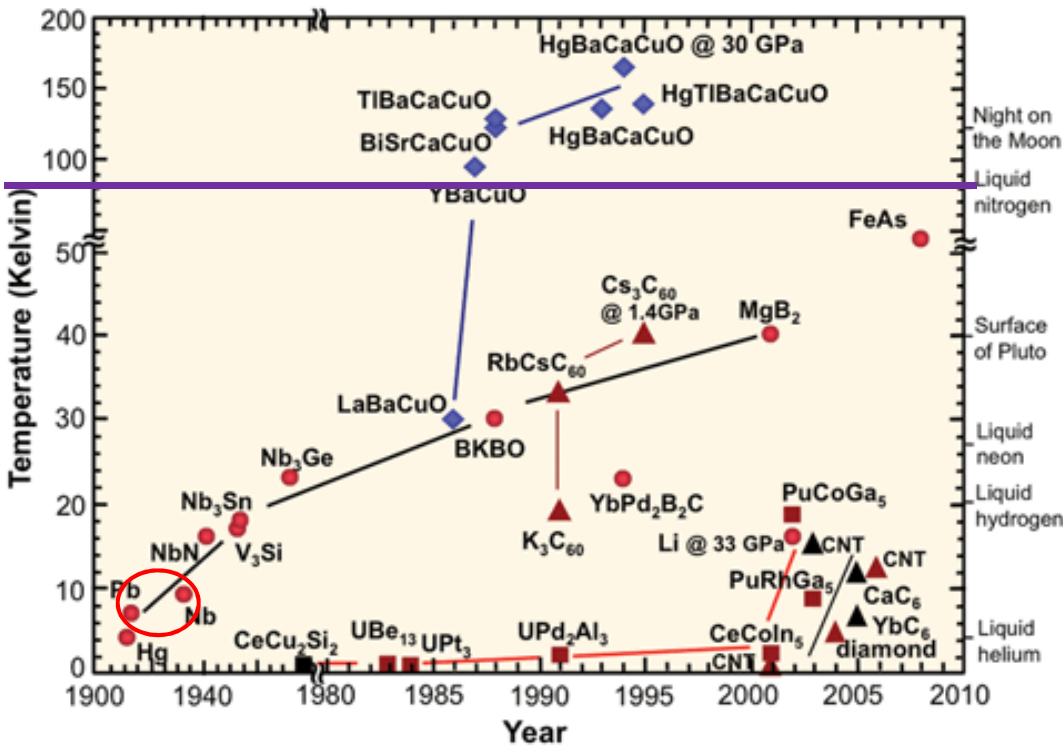


Heike Kamerlingh Onnes – supercondutividade em Hg (4.2K) - 1911



1913

Supercondutividade a “altas” temperaturas.



Wikipedia - “Meissner Effect”



1987

Em 1986, foram descobertas as chamadas cerâmicas supercondutoras, com temperaturas críticas mais elevadas. Bednorz e Muller ganharam o Nobel no ano seguinte pela descoberta.

É sempre possível calcular *a priori*?



1977

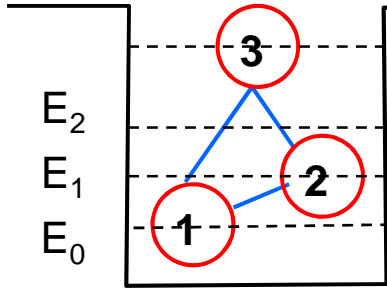
“Nós, teóricos, somos capazes de fazer comentários precisos sobre uma dada substância se soubermos se ela é isolante, magnética, metálica, etc. Mas tomar uma dada combinação de elementos a pre-dizer mesmo fatos triviais *a priori* está além da nossa capacidade.”

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”

Mecânica Quântica: sistemas de muitos corpos.

Uma partícula em uma “caixa”:



Duas partículas *não interagentes*

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

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

ij

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

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

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

(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

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

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

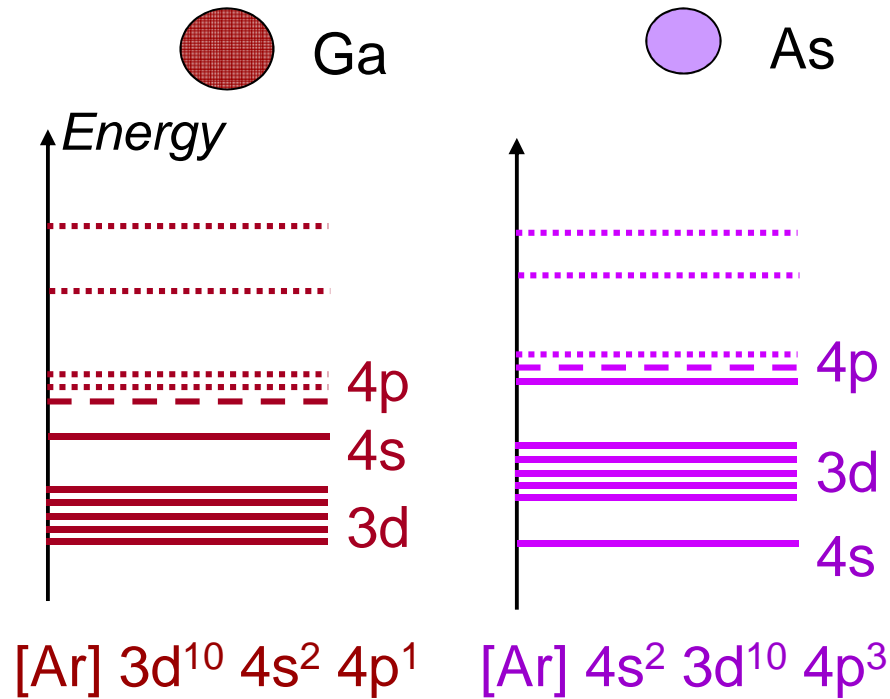
$$E_0 = ?$$

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

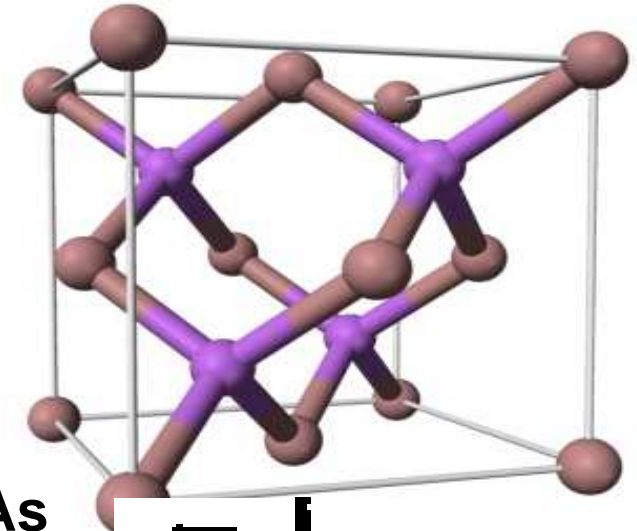
$$\psi_0^{S,A}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_\ell, \dots, \mathbf{r}_N) = \pm \psi_0^{S,A}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_\ell, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N)$$

N partículas *indistinguíveis* (bósons/férmions)

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



Muitos átomos!

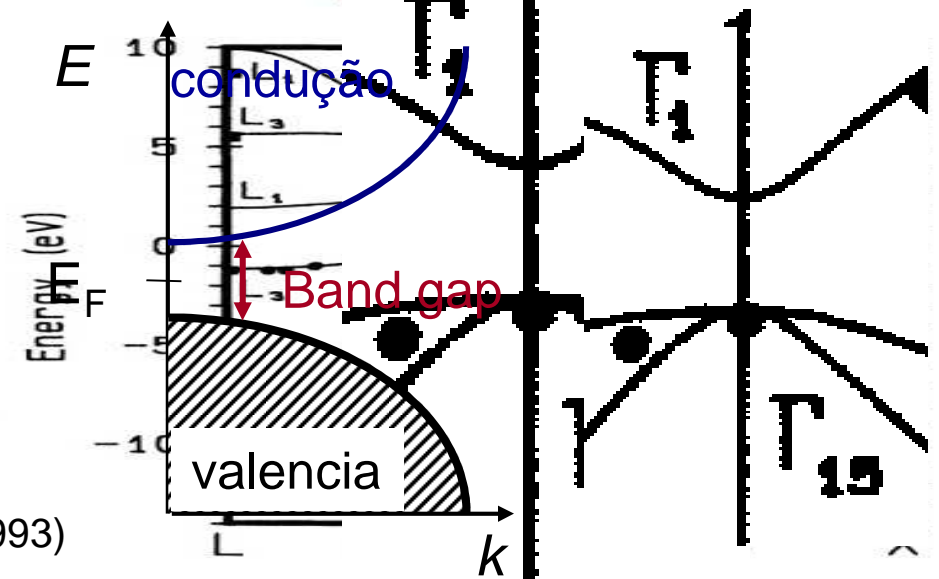


Cristal de GaAs

Níveis de energia
atômicos

Com algumas
aproximações:
Estrutura de
bandas

Muitos átomos!



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

Moral da história:



Robert Laughlin - Stanford
Prêmio Nobel – 1998



1998

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)



David Pines
U.C. Davis

A saída: *Modelos teóricos.*



1977

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"