

# PGF5110 - Física do Estado Sólido I

2as e 4as – 10h-12h.

Sala 210 – Ala 2

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 2018](#))

<http://www.fmt.if.usp.br/~luisdias/Teaching/PosGrad/EstadoSolido2018/>

# Conteúdo (ideal) do curso:

- Elétrons “livres” (ou quase livres): **Metais**.
  - O gás de elétrons livres.
  - Modelos de Drude e Sommerfeld para metais.
  - Potenciais periódicos e teorema de Bloch.
  - O gás de elétrons (quase) livres em uma rede.
- Elétrons “ligados”: **Semicondutores e Isolantes**.
  - Redes cristalinas e espaço recíproco.
  - Modelo de tight-binding.
  - Semicondutores e isolantes.
- **Transporte eletrônico**.
  - Propriedades de transporte em metais e semicondutores.
  - Magnetoresistência e efeito Hall quântico.
- **O papel da topologia em propriedades eletrônicas (\*)**
  - Invariantes topológicos no efeito Hall quântico.
  - Isolantes topológicos.

# Calendário:

		Dom	Seg	Ter	Qua	Qui	Sex	Sab	CALENDÁRIO - PGF5110 -2o sem 2018
AGOSTO		12	13	14	15	16	17	18	Aula 1 Introdução e apresentação do curso. Aula 2 Revisão: férmions livres em uma caixa; superfície de Fermi.
		19	20	21	22	23	24	25	Aula 3 O Modelo de Sommerfeld para metais. Encontro Docentes USP
SETEMBRO		26	27	28	29	30	31	1	Aula 4 Redes cristalinas e potenciais periódicos Aula 5 Teorema de Bloch.
		2	3	4	5	6	7	8	3 a 7/ set Semana da Pátria
		9	10	11	12	13	14	15	Aula 6 O gas de eletrons (quase) livres (Lista 1) Aula 7 Aplicações do modelo de elétrons quase livres.
		16	17	18	19	20	21	22	Aula 8 Modelo de tight-binding. Exemplo 1D com 1 banda. Colóquio UFABC
		23	24	25	26	27	28	29	Aula 9 Exemplos de aplicação de tight-binding.; LCAO, Huckel. Aula 10 Grafeno.
OUTUBRO		30	1	2	3	4	5	6	EUF (não haverá aula)
		7	8	9	10	11	12	13	Aula 11 Comparação entre tight-binding e elétrons quase livres (Lista 2) Aula 12 Comentários gerais sobre estrutura de bandas.
		14	15	16	17	18	19	20	Aula 13 Transporte: oscilações de Bloch e densidade de portadores. Aula 14 Propriedades de transporte em metais/semicondutores.
		21	22	23	24	25	26	27	Aula 15 Propriedades de transporte em metais/semicondutores. Aula 16 Magneto-resistência
		28	29	30	31	1	2	3	Aula 17 Efeito Hall quântico Aula 18 Quantização da resistividade e estados de borda
NOVEMBRO		4	5	6	7	8	9	10	Aula 19: Fases de Berry (Lista 3) Aula 20: Condutância Hall e número de Chern.
		11	12	13	14	15	16	17	Aula 21: Isolantes Topológicos e Quantum Spin Hall Effect. Aula 22: Isolantes Topológicos e Quantum Spin Hall Effect.
		18	19	20	21	22	23	24	Aula 23: Semi-metais de Weyl.
		25	26	27	28	29	30	1	Aula 24: Supercondutores topológicos e estados ligados de Majorana. Aula 25: Supercondutores topológicos e estados ligados de Majorana.
DEZ		2	3	4	5	6	7	8	(ENCERRAMENTO DAS AULAS) (Lista 4)

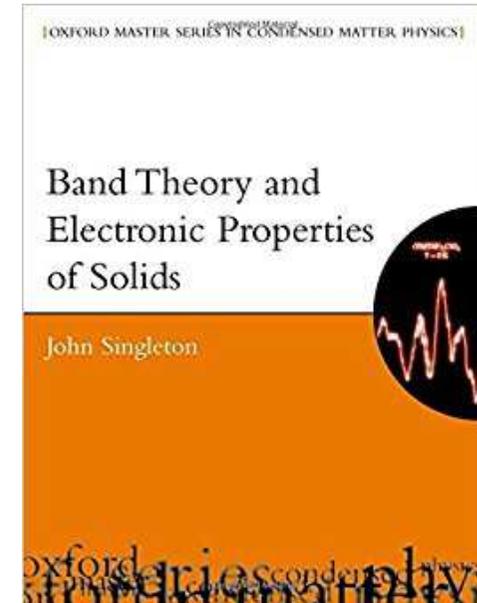
	Aula normal
	Entrega de Lista
	Não haverá aula
	Feriado

# Bibliografia do curso:

Texto principal:

- John Singleton, "Band Theory and Electronic Properties of Solids", Oxford University Press (2001).

Um livro "direto ao ponto" que contém o essencial do que precisamos saber sobre Estado Sólido.



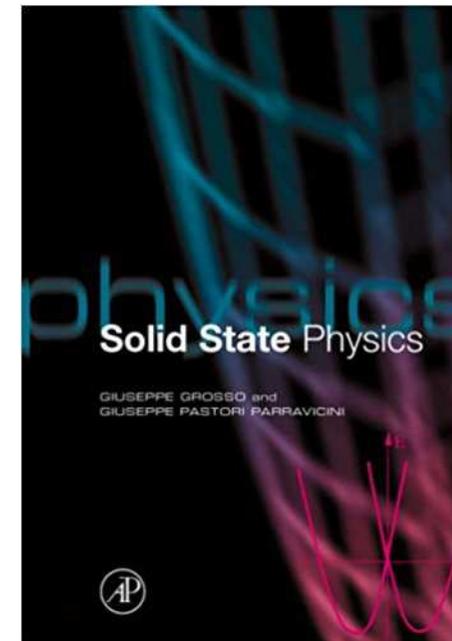
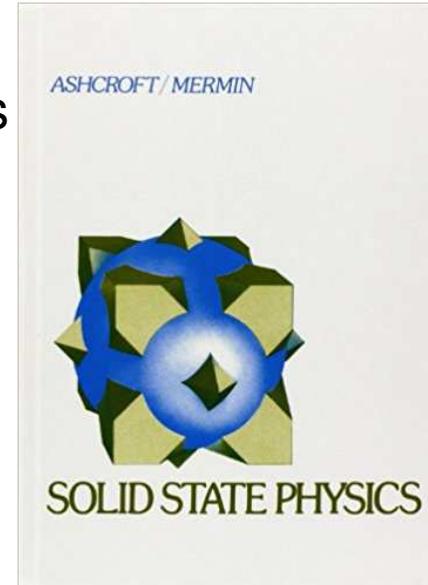
Textos auxiliares (para um aprofundamento):

- Ashcroft e Mermin, "Solid State Physics", Brooks Cole (1976).

Um clássico mas um pouco destualizado.

- Giuseppe Grosso e Giuseppe Parravicini, "Solid State Physics", Associated Press (2000)

Boa referência mais atual, com bons exemplos.



# Avaliação (regras do jogo):

- Listas de exercício (80%):
  - 4+1 Listas de exercício ao longo do semestre.
  - Listas são INDIVIDUAIS (discussões em grupo ok!)
  - Entrega no *início* da aula da data indicada na Lista.
  - Listas entregue na data mas após a aula = 0,5 ponto de desconto.
  - Listas entregues no dia seguinte à data de entrega: 1,5 ponto de desconto. Após esse prazo, não serão aceitas entregas.
- Trabalhos em sala (20%):
  - Tarefas feitas em sala nas aulas e entregues no mesmo dia.
- Nota final e conceito:
  - 0-4.9 = **R**      5 – 6.9 = **C**    7 – 8.9 = **B**    9 - 10 = **A**

# 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

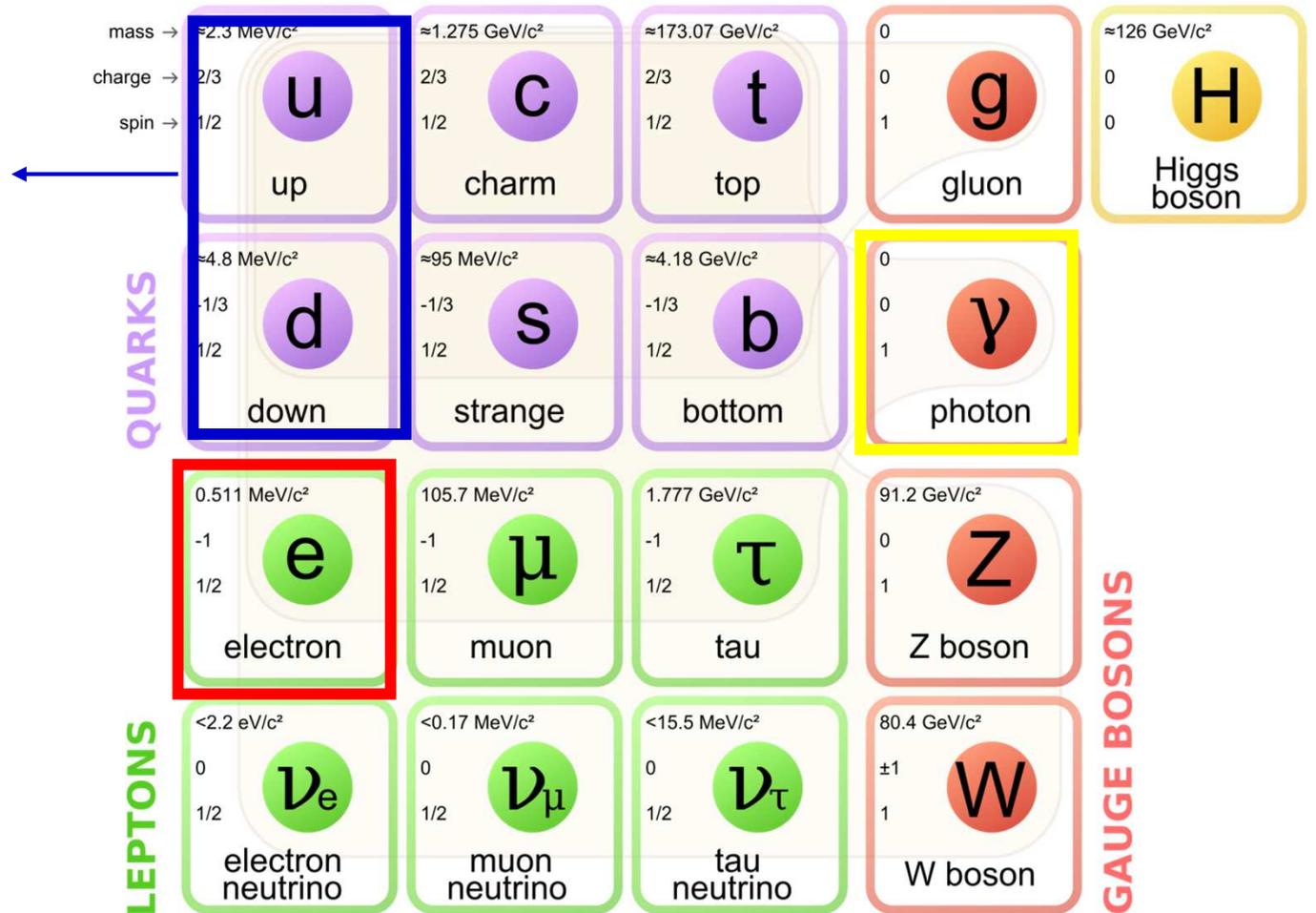
Em Física dos Materiais, a pergunta é expressa pela Eq. de Schrödinger:

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

# 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

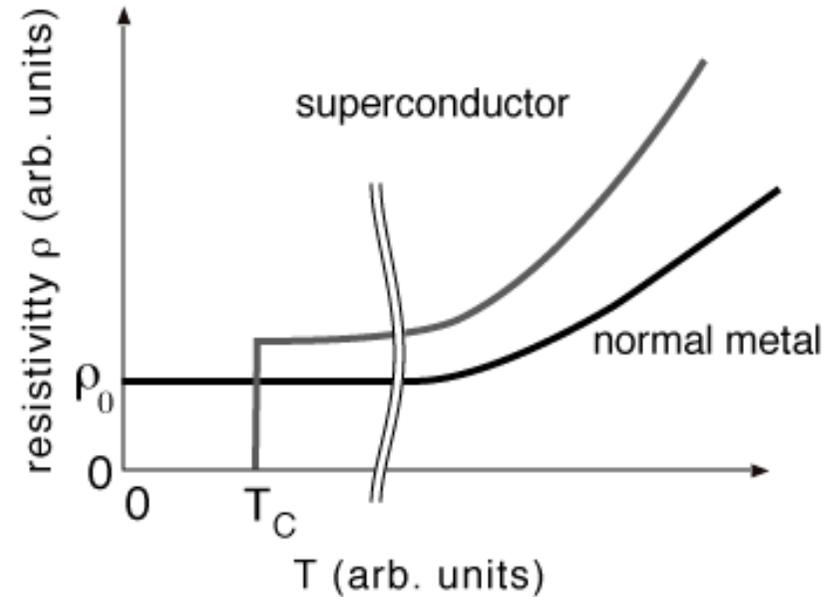
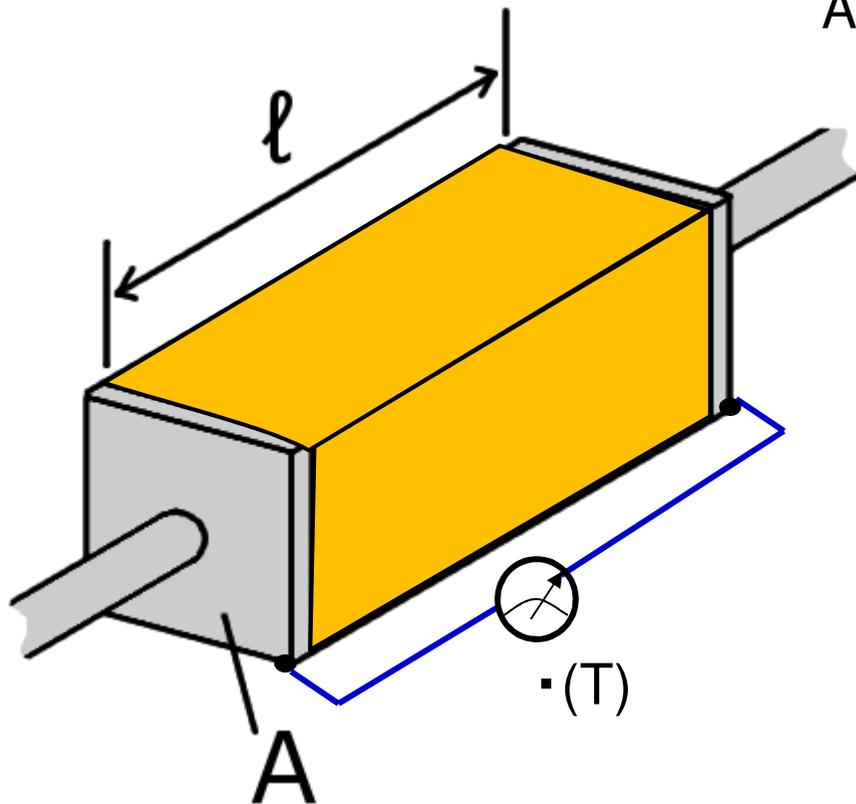
“ O comportamento de grandes e complexos agregados de partículas elementares não pode ser entendido em termos de uma simples extrapolação das propriedades de algumas poucas partículas.

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.

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



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

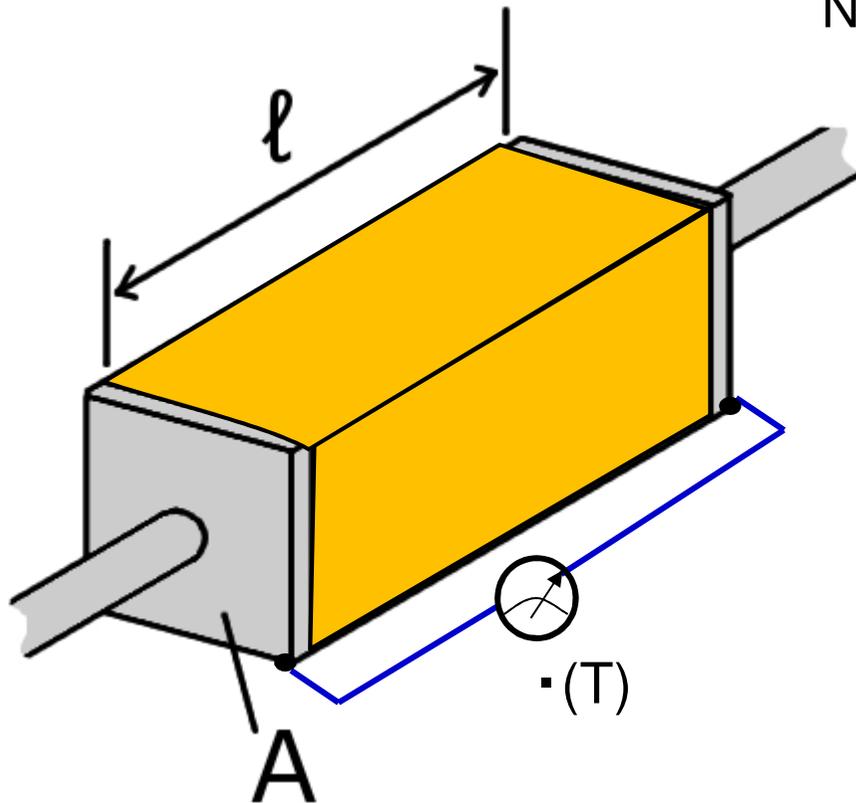
$$\rho = R \frac{A}{l}$$

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.

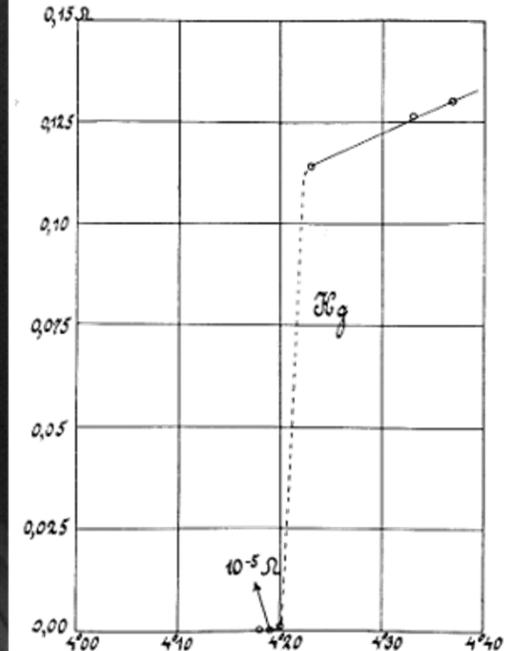
No caso de mercúrio, por exemplo, a resistividade vai a zero abaixo de 4.2 Kelvin.



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

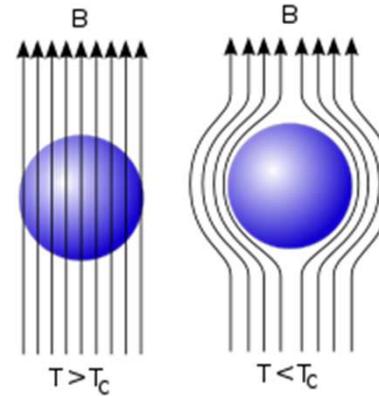
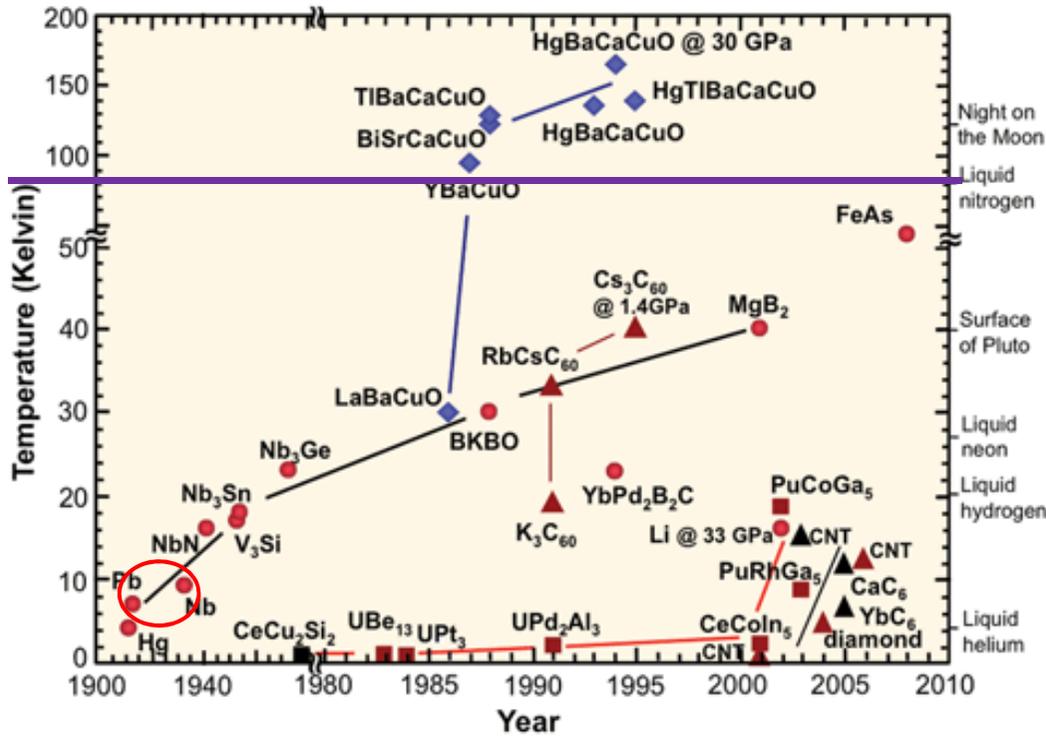


Heike Kamerlingh Onnes – supercondutividade em Hg (4.2K) - 1911



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

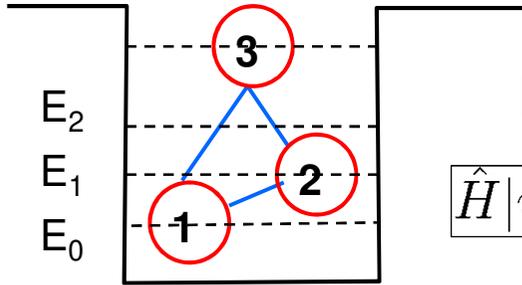
“Nós, teóricos, somos capazes de fazer comentários precisos sobre uma dada substância se soubermos se ela é isolante, magnética, metálica, etc. Mas tomar uma dada combinação de elementos a pre-dizer mesmo fatos triviais *a priori* está além da nossa capacidade.”

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 *interagentes*

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

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

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

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

$ij$

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

(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

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

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

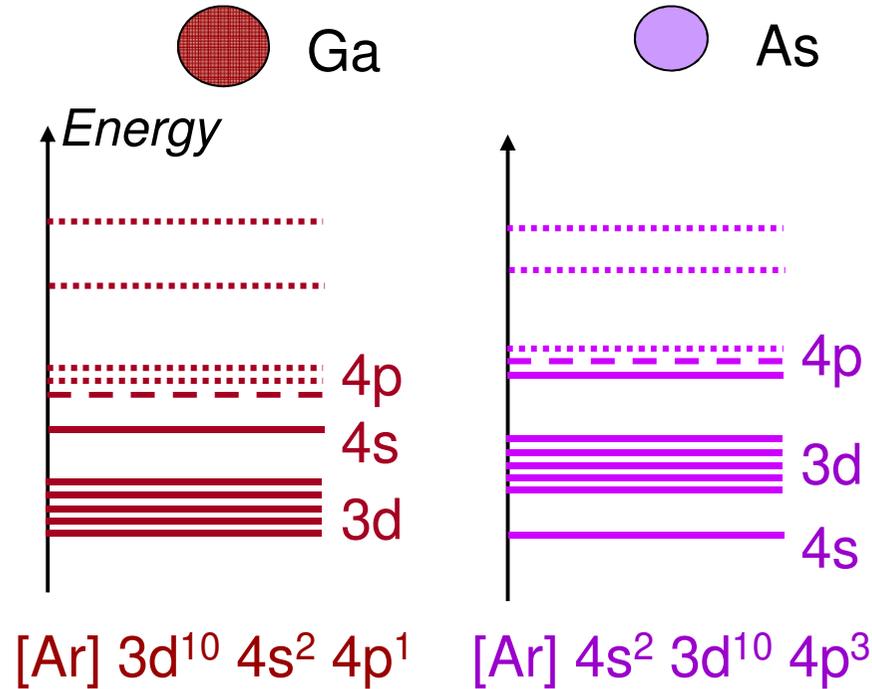
$$E_0 = ?$$

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

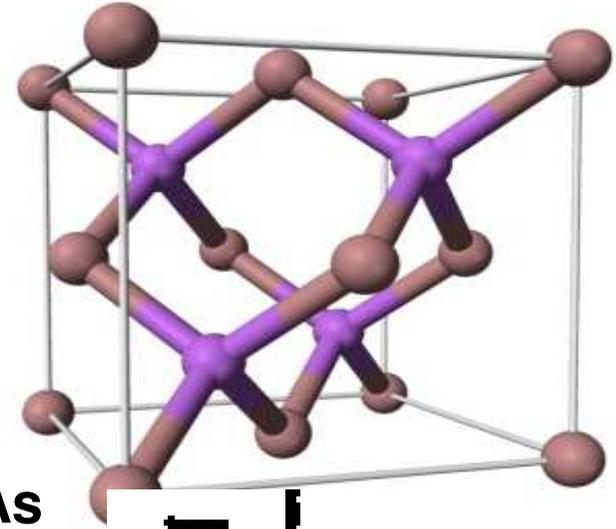
$$\psi_0^{S,A}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_l, \dots, \mathbf{r}_N) = \pm \psi_0^{S,A}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_l, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N)$$

N partículas *indistinguíveis* (bósons/férmions)

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



Muitos átomos!

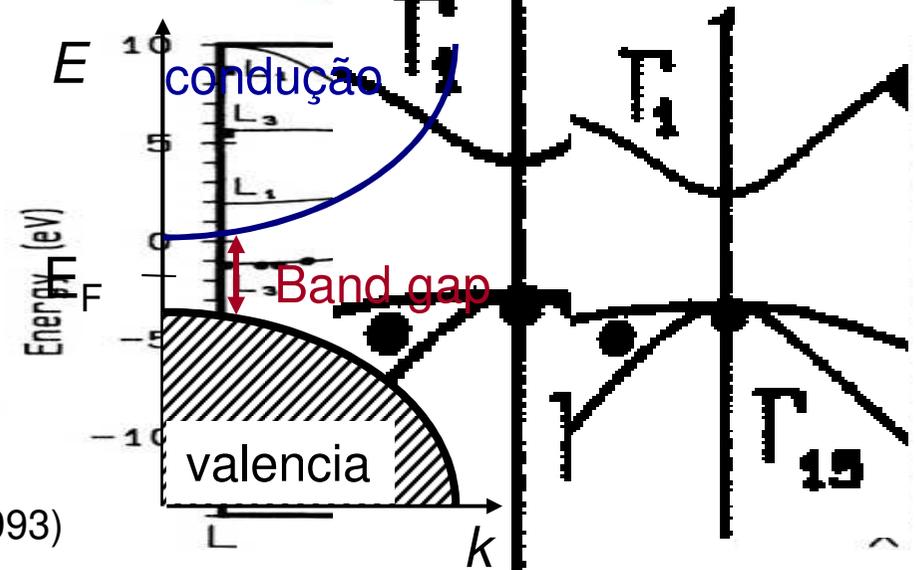


**Cristal de GaAs**

Níveis de energia atômicos

Com algumas aproximações:  
Estrutura de bandas

Muitos átomos!



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

# Moral da história:



1998

Robert Laughlin - Stanford  
Prêmio Nobel – 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



David Pines  
U.C. Davis

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

# 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”