

Mais é Diferente

Emergência de propriedades coletivas num isolante de Mott

por Francisco Brito, finalista do Mestrado Integrado em Eng. Física Tecnológica

A física clássica não descreve corretamente uma vasta gama de fenómenos, ditos quânticos. Naturalmente, a teoria quântica difere em vários aspetos da bem conhecida teoria clássica, ou newtoniana. Foquemos uma das diferenças particularmente importantes para o nosso sistema de interesse: a noção de distinguibilidade. A descrição clássica de um gás consiste num conjunto de partículas (imaginem-se bolas de bilhar) em permanente movimento. Cada partícula tem uma dada energia cinética devido à agitação térmica. A sua velocidade é alterada sempre que colide com outra partícula (ou, mais raramente, quando uma partícula colide com a parede do recipiente). Assumindo que o sistema está em equilíbrio térmico, a distribuição da energia cinética total pelas partículas é bem definida e está centrada em torno de um valor médio. Esta distribuição define a temperatura do sistema. Embora o movimento das partículas seja determinístico, tipicamente um gás tem um número demasiado grande de partículas para que possamos resolver o sistema de equações de movimento correspondente. A abordagem usual é probabilística. As propriedades termodinâmicas de um sistema são obtidas através de considerações estatísticas ("a média de uma dada quantidade é x "). O leitor exigente estará, neste ponto, insatisfeito. Certamente, já terá concluído que nem sempre a média é um bom indicador estatístico em determinadas situações do dia a dia. No entanto, neste caso, a média é particularmente útil porque as flutuações em torno desta são absolutamente irrelevantes para um número de partículas da ordem da constante de Avogadro. A validade do tratamento estatístico referido acima depende de uma condição que tomamos, em geral, por garantida: a de que as partículas são distinguíveis.

No caso quântico, a distribuição de energias de um sistema é resultado da natureza intrinsecamente probabilística do sistema. Contrariamente ao caso familiar de partículas clássicas, não é possível distinguir partículas quânticas do mesmo tipo. De facto, o próprio conceito de individualidade de cada uma destas partículas - ditas idênticas - deve ser abandonado. O comportamento do sistema só pode ser descrito coletivamente e não é possível descrevê-lo por simples extrapolação das propriedades das partículas que o constituem. Em 1927, Sommerfeld aplicou este conceito para adaptar a teoria da gás clássico a partículas quânticas. Este modelo relativamente simples, dito de elétron livre, já captura algumas das propriedades dos metais!

Uma forma de decidir se podemos tratar um sistema classicamente ou se temos de recorrer à teoria quântica é

estimar a chamada ação típica associada ao fenómeno em estudo. Fenómenos quânticos têm ação típica da ordem da constante de Planck, $h \sim 10^{-33} \text{ kgm}^2/\text{s}$. Quais as ordens de grandeza das quantidades que definem a ação das partículas num sólido? Por exemplo, um elétron, de massa 10^{-30} kg , velocidade 10^6 m/s , movendo-se de distâncias da ordem do Å ($1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$) tem ação típica $10^{-34} \text{ kgm}^2/\text{s}$. Logo, um elétron num sólido é quântico!

Para descrever elétrons num sólido consideramos um sistema de átomos numa rede periódica; suponhamo-la quadrada. Os elétrons são muito mais leves que os núcleos de cada átomo, que são vistos como quase imóveis por comparação. Num átomo isolado, um elétron pode tomar valores discretos de energia, ocupando um dado nível de energia. Por outro lado, elétrons no sistema complexo de átomos no sólido assumem valores em bandas de energia, espaçadas, ou não, por zonas proibidas e que são ocupadas sequencialmente, por ordem crescente de energia. Cada banda pode ser ocupada por um número de elétrons igual a duas vezes o número de átomos na rede (o factor de dois deve-se ao número quântico de spin). A teoria de bandas classifica os sólidos como sendo metais se existirem bandas parcialmente preenchidas, ou isoladores se a última banda preenchida, dita de valência, estiver totalmente ocupada e a seguinte, dita de condução, totalmente vazia. A separar a banda de valência e a de condução existe um hiato energético (gap em inglês). A figura 1 ilustra estes dois comportamentos, sendo que um terceiro, o de semicondutor, é habitualmente realçado dada a sua importância tecnológica, embora este não seja mais do que um isolador com hiato inferior a cerca de 4eV. A teoria de bandas teve enorme sucesso até se verificar que esta falha na classificação dos chamados isoladores de Mott, que a teoria prevê serem condutores.

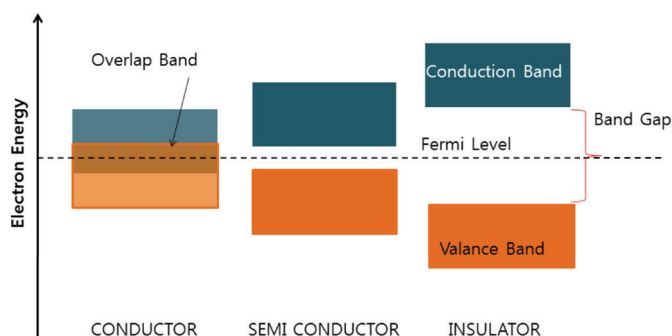


Figura 1: Classificação de materiais de acordo com a teoria de bandas.

De facto, um dos pressupostos da teoria de bandas é que os eletrões são insensíveis à presença uns dos outros (não se vêem): despreza-se a interação de Coulomb entre eles. Na verdade, a validade deste pressuposto depende do material em estudo. A conjugação das várias interações no sólido pode originar fenómenos muito variados. Por vezes, alguns efeitos cancelam-se, ou amplificam-se mutuamente. Mesmo que a interação eletrónica em si não seja desprezável, pode ser cancelada por outros efeitos. Contudo, nos isoladores de Mott, são as interações repulsivas de Coulomb entre os eletrões as responsáveis pelo comportamento isolador. Neste caso, são as correlações, ou interdependências, entre os eletrões num sólido que conduzem à emergência de propriedades puramente coletivas.

Num sistema correlacionado, o “movimento” de uns afecta o de outros. Talvez a situação fique mais clara considerando uma analogia. Quando uma onda sonora se propaga, as moléculas no ar oscilam coletivamente. Se não fosse o caso, isto é, se as flutuações de densidade fossem aleatórias, não ouviríamos qualquer som. Este é um fenómeno cuja ocorrência depende de um comportamento coletivo, de correlações entre as moléculas. Ora, num sistema correlacionado, como um conjunto de eletrões interagindo entre si, o mesmo acontece: há fenómenos que só se explicam considerando a interação entre elementos. O comportamento colectivo apenas é possível porque os vários constituintes do sistema são sensíveis à presença uns dos outros. Este dá origem à emergência de propriedades frequentemente contraintuitivas. Um exemplo físico simples é o de um íman. A descrição microscópica de um íman consiste em imaginar que cada átomo contém aquilo a que se chama um momento magnético. Por simplicidade, imaginemos um momento magnético como uma bússola. Imaginemos que a direção em que cada bússola está alinhada (fora da ação do campo magnético terrestre) afeta o alinhamento das outras. Então, uma situação em que todas as bússolas, ou momentos magnéticos, apontam na mesma direção é um exemplo de comportamento emergente, dando origem ao magnetismo. Este fenómeno emergente não ocorre espontaneamente para um só momento magnético. É de natureza coletiva e ocorre devido ao elevado número de átomos num sólido.

Voltemos ao caso do isolador de Mott. Em certos materiais (nomeadamente óxidos de metais de transição), quando a pressão é elevada, o salto dos eletrões de um átomo para outro é favorecido. Em termos energéticos, isto traduz-se numa elevada energia cinética dos eletrões que conduz ao estabelecimento de uma corrente elétrica: o material é então um metal. A alta pressão, os outros termos energéticos, como o correspondente às interações eletrónicas, são menos relevantes face ao termo cinético. Ao diminuirmos a pressão, eventualmente encontramos uma pressão crítica que separa a fase metálica de alta pressão da fase isoladora. À pressão crítica, o termo das interações é tão relevante como o cinético e a corrente é inibida.

O modelo de Hubbard é o mais simples que é capaz de capturar a essência da transição de Mott. Neste, por um lado, assume-se que os eletrões de valência saltam entre orbitais de diferentes átomos. Esta situação favorece o estabelecimento de uma corrente. Em contraste, a situação

em que dois eletrões de spins opostos ocupam a mesma orbital, de acordo com o princípio de Pauli, é desfavorecida devido à repulsão de Coulomb, que é particularmente relevante quando os eletrões estão mais próximos, ocupando a mesma orbital de um dado átomo. O aparecimento de uma fase isoladora deve-se ao facto de a situação em que temos um eletrão por orbital, evitando dupla ocupação, ser particularmente favorável. O “movimento” electrónico (através de saltos entre orbitais de diferentes átomos) requer dupla ocupação. Esta implica uma forte penalização energética. Logo o sistema é um isolador dado que o estabelecimento de uma corrente é desfavorecido. Os eletrões tendem a ficar “presos” aos átomos que ocupam. Em contraste, note-se que no caso da teoria de bandas, o sistema com um eletrão por átomo é um metal pois corresponde a uma banda semi-preenchida.

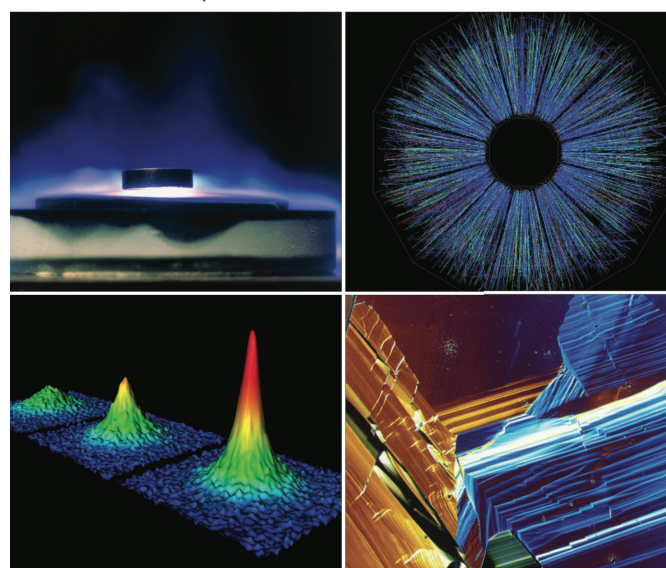


Figura 2: As correlações fortes entre as partículas que compõe um sistema são o elemento em comum entre alguns fenómenos físicos fascinantes como (no sentido dos ponteiros do relógio, desde o canto superior esquerdo) supercondutores a alta temperatura, plasmas quark-gluão, supercondutores orgânicos e - mediante determinadas condições - nuvens de átomos ultrafrios.

Os isoladores de Mott podem ser usados para fabricar dispositivos de memória de escrita rápida (10^{-100} ns). Nestes dispositivos, o controlo da ocupação das orbitais eletrónicas é fundamental. As transições de fase estruturais e eletrónicas do sistema correlacionado estão na origem das suas propriedades peculiares. A alternância entre estados coletivos sob ação de estímulos externos permite codificar, armazenar e processar informação. Os isoladores de Mott poderão também ser cruciais na fabricação do memristor, um componente neuromórfico, usado para imitar a arquitetura neurobiológica do sistema nervoso num circuito elétrico, como a própria designação indica. Num memristor, a resistência elétrica depende da corrente que circulou no componente no passado. A história do sistema afeta as suas propriedades: o dispositivo “lembra-se” do seu passado. A esta propriedade chama-se não-volatilidade. No cérebro, os neurónios vão-se adaptando ao longo do processo de aprendizagem, preservando “memória” da sua história e as sinapses possuem plasticidade. Este efeito poderá ser replicado pelo memristor. ■