Propriedades quânticas dos materiais (1a Aula)

Tatiana G. Rappoport
CBPF
@tgrappoport

https://tgrappoport.github.io/page

Algumas idéias de mecânica quântica

Dos átomos aos sólidos

Manipulando os sólidos

Escala e visibilidade

1m

1mm= 10^{-3}m

1mm

1µm= 10^{-6}m

1µm

1nm= 10^{-9}m

1nm

1 Angstron= 10^{-10}m

OH

MO

ME

-Eu 1,62 m

-Formiga ~5 mm

-cabelo ~100 µm

-DNA ~2 nm

-molécula de água ~0.3 nm

Dualidade onda-partícula

- Luz é composta por partículas sem massa (fótons)
  - $E=hc/\lambda$

  - h é a constante de Planck e c é a velocidade da luz
- Partículas são representadas como ondas de probabilidade
- Louis de Broglie (1924) : $\lambda=h/p$

Bola

Massa: 1 kg - Velocidade: 10 m/s

$\lambda=6{,}6\times10^{-35}$ m $=6{,}6\times10^{-35}$ Angstrons

Raio do Hidrogênio: 0,53 Angstrons

Tunelamento quântico

$\psi(\vec{r}, t)$ = função de onda de probabilidade

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$ = probabilidade de encontrar uma partícula em r

http://rugth30.phys.rug.nl/quantummechanics/tunnel.htm

Funções de onda de probabilidade

Ondas estacionárias:

Frequências características

Elétrons numa caixa

- Discretização das energias é característica das ondas de probabilidade confinadas

paredes infinitas

paredes finitas

L=3,9

Átomos

- Probabilidade de encontrar o elétron no espaço
- Orbitais quantizados
  - 1s, 2s, 2p (x,y,z), 3s etc

$$E_{fotons} = \frac{hc}{\lambda}$$

Spin

Experimento de Stern-Gerlach(1922): Um feixe de átomos de prata se divide em dois quando passa por um campo magnético:

- Spin: Momento angular intrínseco S
- Propriedade do elétron, como massa e carga
  - Momento magnético μ associado a S
  - Elétron se comporta como um pequeno im

$$S_z = \pm \frac{1}{2}\hbar$$

$$U = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\mu_z B$$

Princípio da exclusão de Pauli

- Dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico
- Cada orbital atômico pode ter dois elétrons
- Se mais elétrons são introduzidos no sistema, eles irão ocupar níveis de energia mais alta, pois os mais baixos já estarão preenchidos

Surgimento de bandas de energia

Surgimento de bandas de energia

Surgimento de bandas de energia

Condução

Variação de energia:

Elétrons em um sólido

Metal

Isolante

Semicondutores e isolantes

Banda de Condução (1ª banda vazia)

elétron livre → tem massa e carga

buraco → também tem massa e carga ...

Banda de Valência (última banda cheia)

Gap

E_g *grande* → *ISOLANTE* *(vários eV)*

E_g *pequeno* → *SEMICONDUTOR*

Doador do tipo n

Doador do tipo p

Eletrônica

Da Wikipedia (inglês):

A eletrônica trata do estudo e uso de dispositivos elétricos que são operados pelo controle do fluxo de elétrons ou outras partículas eletricamente carregadas.

Fluxo de elétrons

- Elétrons tem carga elétrica negativa. Quando eles se movem (livres do núcleo dos átomos) e existe um fluxo resultante, este fluxo se chama corrente elétrica.

- Resistores

- Capacitores

- Diodos

- Transistores

Papel fundamental dos dispositivos baseados em semicondutores, como transistores e diodos.

Transistores na eletrônica

- Feitos de semicondutores
- Fundamentais em todos os circuitos eletrônicos

Porta controla corrente entre entrada (fonte) e saida (dreno)

- Amplificação
- Chaveamento (liga-desliga)

A vida antes do transistor

Bell Labs 1948
Prêmio Nobel de Física 1956
Shockley, Bardeen, Brattain

Circuitos integrados

- Permitiu grande revolução na eletrônica
- Circuitos desenhados em um único semicondutor

1958 Texas Instruments
Prêmio Nobel de Física 2000
J. S. Kilby

Fazendo um chip

http://nobelprize.org/educational/physics/integrated_circuit/history/index.html

LEDs (diodos)

LEDs (diodos)

+
-
tipo p
tipo n
buracos
elétrons
banda de condução
Luz
gap (banda proibida)
banda de valência

Dimensões reduzidas

Poços quânticos
(2D)

Prêmio Nobel de Física:
K. von von Klitzing (1985)
D.C. Tsui e H.L. Stoermer (1998)
Z. I. Alferov e H. Kroemer (2000)

Fios quânticos
(1D)

Pontos quânticos
(0D)

Poços quânticos

Pontos quânticos

- "Átomos artificiais"
  - Espectro discreto
  - Cor da luz emitida depende do tamanho
  - Diversas aplicações

mais sobre LEDs

- LEDs orgânicos (OLEDs):
  - Cor depende do composto
  - Finos e flexíveis
  - Sensíveis a água e Oxigênio

- LEDs de pontos quânticos:
  - Fácil obter todas as cores
  - Finos e flexíveis
  - Mais resistentes

Aula 1b: Grafeno: o primeiro material bidimensional

O que é?

Porque o(a)s físico(a)s se interessam tanto

Grafeno

Para que serve?

Outubro de 2010

The Nobel Prize in Physics 2010
Andre Geim, Konstantin Novoselov

- **The Nobel Prize in Physics 2010**
- Nobel Prize Award Ceremony
- Andre Geim
- Konstantin Novoselov

Photo: U. Montan

Andre Geim

Photo: U. Montan

Konstantin Novoselov

The Nobel Prize in Physics 2010 was awarded jointly to Andre Geim and Konstantin Novoselov *"for groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene"*

Photos: Copyright © The Nobel Foundation

Mas nossa estória começa em 2000...

Andre Geim ganhava o Ig Nobel de Física por levitar um sapo

Experimentos de 6ª a noite

Experimentos simples, novos e sem compromisso em áreas de pesquisa diferente da que normalmente trabalhamos

2002-E o grafite? Conhecemos há tantos anos mas não sabemos nada sobre camadas bem finas desse material

Como obter folhas finas de grafite?

- Em vez de tentar fabricar folhas finas, arrancar folhas finas de um pedaço de grafite

O que são grafite e grafeno?

➡Cristais feitos de átomos de Carbono

Grafite

Grafeno: uma única folha

Do grafite pro grafeno: método do durex

Ozyilmaz' Group, Graphene Research, National University of Singapore

Do grafite para o grafeno

0.1 mm

Sobre óxido de silício

- Espessura relacionada à cor

1-5 camadas

10-30 camadas

100 camadas

microscópio ótico

Imagem Grupo de Manchester

Achando o grafeno

2004

1 μm = 0.001 mm

Grafeno em detalhes

Microscópio ótico

Microscópio eletrônico de varredura

Microscópio eletrônico de tunelamento

Imagem Grupo de Rutgers

1nm= 0.001μm

Mas por que o(a)s físico(a)s se interessaram tanto?

Propriedades físicas muito interessantes

O que medir?

Como medir?

É preciso nanotecnologia

Propriedades elétricas

Fazendo os contatos elétricos

- Imagem de microscópio eletrônico de varredura (MEV)

Fazendo os contatos elétricos

- Imagem de microscópio eletrônico de varredura (MEV)
- Design

Fazendo os contatos elétricos

- Imagem de microscópio eletrônico de varredura (MEV)
- Design
- Dispositivo

Dispositivo

Elétrons no grafeno

- Grafeno conduz muito bem (como um metal)
- Mas cargas podem ser controladas como num semicondutor

Elétrons no grafeno

- Mobilidade recorde de 1000000 $cm^2/(V \cdot s)$ em grafeno suspenso a baixa temperatura
- Mobilidade de 50000 $cm^2/(V \cdot s)$ a temperatura ambiente

Si: < 2000 $cm^2/(V \cdot s)$

Maior que em qualquer semicondutor

Elétrons no grafeno

- Em materiais, elétrons podem se comportar como se tivessem massa maior ou menor do que a que eles tem quando livres
- No grafeno, eles se comportam como se não tivessem massa
  - Partículas relativísticas sem massa
    - Férmions de Dirac
    - Neutrinos são Férmions de Dirac
    - Neutrinos viajam a $v=c$, elétrons no grafeno têm v menor

Como sabemos?

Efeito Hall

1879 Edwin H. Hall

http://www.magnet.fsu.edu/education/tutorials/java/index.html

Efeito Hall

Elétrons em semicondutores e metais

- Inclinação da curva nos fornece número de elétrons/Volume
- Usado para caracterizar semicondutores

Efeito Hall quântico

mas a baixa T e em 2D...

$\rho_{xy}=h/(e^2N)$

N é um número inteiro!

h e e são constantes

Efeito Quântico!

- Descoberto em 81 por Klaus von Klitzing, Nobel em 85
- Resistividade é quantizada!
- Usado em metrologia como medida padrão

Efeito Hall quântico

Partículas relativísticas sem massa

Elétrons em semicondutores

$\rho_{xy}=h/(e^2N)$

Elétrons no grafeno

$\rho_{xy}=h/(4e^2(N+1/2))$

Temperatura ambiente!

Efeito Hall quântico no grafeno

Partículas relativísticas sem massa

Einstein

Bohr

Efeito Quântico!

Temperatura ambiente!

Outros materiais 2D

Semimetal

Graphene

Insulator

BN

Superconductor

$NbSe_2$

Ferroelectric

SnTe

Semiconductor

WSe_2

Ferromagnet

CrI_3

Quantum spin Hall insulator

WTe_2

Multiferroic

NiI_2

Bicamada torcida e padrões de Moiré

Bicamada torcida e padrões de Moiré

Borboleta de Hofstadter

Φ

D. R. Hofstadter PRB 1976

Nature 2013
(D.C. Elias)

Supercondutividade na bicamada torcida

Pablo Jarillo-Herrero
Nature 2018

Controlando o ângulo

Bicamada torcida de grafeno

Graphene Bilayer with a Twist: Electronic Structure
J. M. B. Lopes dos Santos, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto
Phys. Rev. Lett. **99**, 256802 (2007).

$$\lambda_{g-g} = \frac{a}{2\sin\frac{\theta_{g-g}}{2}}$$

Supercondutividade na bicamada torcida