RESUMO DO TRABALHO

A física da matéria condensada procura estudar, a nível fundamental, a interação dos elétrons com os núcleos atômicos e com os outros elétrons do sistema, e como elas resultam nas propriedades dos materiais que observamos no nosso cotidiano. A escala desses sistemas nos leva, em muitos casos, à utilização da Mecânica Quântica, que nos permite descrever se um sistema conduz eletricidade ou não, por exemplo. O problema é que devido à complexidade da teoria e dos sistemas de muitos átomos, simplificações são necessárias, e em muitos casos elas nos levam à contradições com resultados experimentais. Uma dessas aproximações desconsidera as interações locais entre elétrons dentro dos materiais, causada pelo eletromagnetismo. Essa aproximação funciona bem para alguns sistemas, permitindo que as propriedades dos materiais previstas pela teoria sejam condizentes com resultados experimentais. Entretanto, no material estudado, o FeO (Óxido de Ferro II), essa aproximação falha, e um material que experimentalmente se apresenta como isolante é previsto como condutor pela teoria Quântica. Dessa forma, nosso trabalho consistiu em estudar uma correção à teoria a qual leva em conta a interação entre elétrons. Para tal, utilizamos a teoria do Funcional da Densidade combinada com o modelo de Hubbard que leva em consideração essa forte interação. Assim, conseguimos prever o FeO como isolante, em concordância com resultados experimentais. Surpreendentemente a superfície foi prevista como condutora. Esse resultado é interessante pois a descrição da superfície do Óxido de Ferro II estudada é um problema em aberto na física, o que configura nossa contribuição para o problema. Além disso, determinamos as propriedades magnéticas do FeO que também concordam com os resultados previstos experimentalmente.

Imagens –

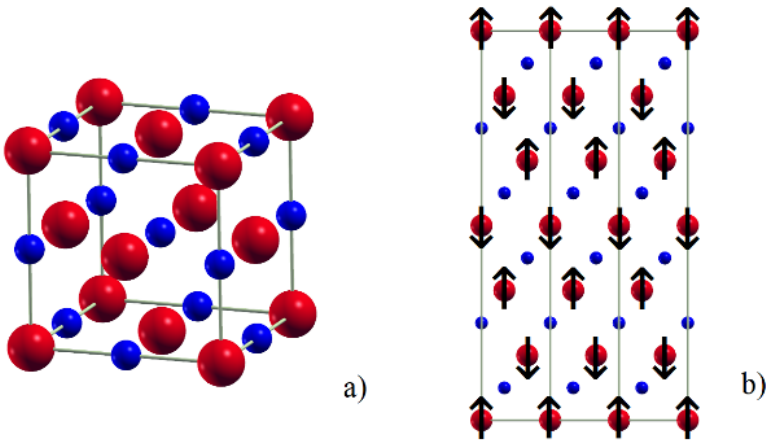


Figura 1 *– disposição dos átomos de Ferro e Oxigênio no FeO.*

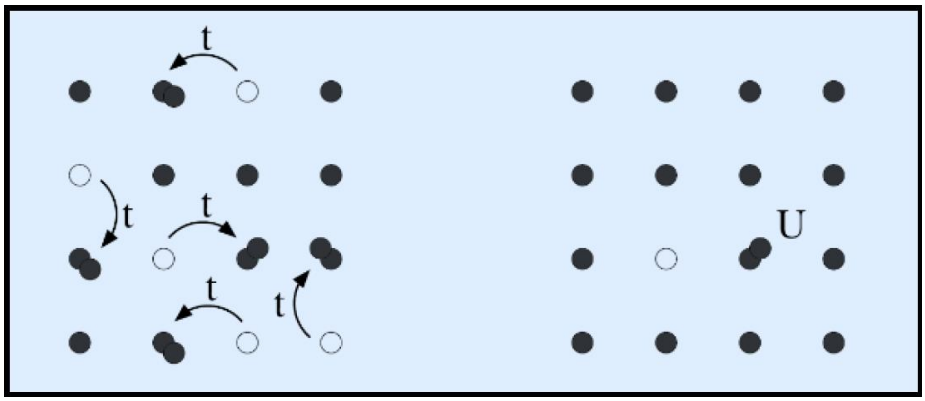


Figura 2 *– Ilustração de um modelo de material com interação eletromagnética não desprezível: Os pontos pretos são os elétrons, e a letra U representa dois elétrons interagindo de maneira não desprezível.*

$$V_{XC}^{U} = U \sum_{im} \left(\frac{1}{2} - n_m^{i\sigma} \right) |m\rangle\langle m|$$

Figura 3 *– Correção adicionada. Percebe-se a presença da letra U, ou interação eletromagnética não desprezível.*

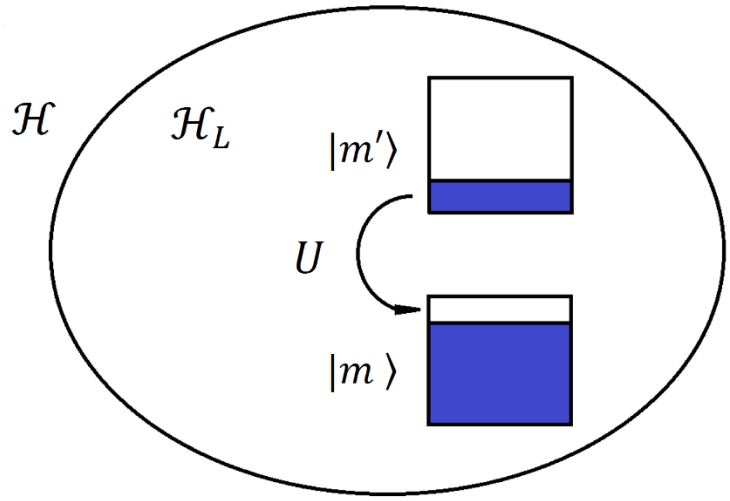


Figura 4 *– Diagrama ilustrando a ação da correção no sistema. Ela tende a jogar elétrons dos estados m' para os estados m, gerando um material isolante.*