

- Física da Matéria condensada

(1)

Da Wikipédia: "Física da matéria condensada é o campo da física que trata com as propriedades físicas microscópicas e macroscópica da matéria. Em particular, é a que se ocupa com a fase "condensada" que aparece sempre que o número de constituintes em um sistema é extremamente grande e as interações entre esses constituintes forte. Os exemplos mais famosos de fases condensadas são sólidos e líquidos, que se originam das forças eletromagnéticas entre átomos."

O uso do termo "matéria condensada" foi introduzido por Phillip W. Anderson (1923-2020)

Nesse curso, focaremos-nos, essencialmente, em um subconjunto desse campo conhecido como "Física do Estado Sólido".

Por lidar com um número grande de partículas, não há a esperança de obter o movimento individual dos constituintes. Não existe a possibilidade de observar o movimento de, digamos, 10^{23} partículas. Podemos, contudo, observar variáveis macroscópicas como densidade de partícula, densidade de momento, magnetização, etc. São essas variáveis que distinguem as muito diferentes fases termodinamicamente estáveis da matéria: líquidos fluem, sólidos são rígidos; existem isolantes, metais, semicondutores, supercondutores, e assim por diante

Os conceitos unificadores desse grande ramo de Física da Matéria Condensada são: leis de conservação, quebra de simetria e excitações elementares. ②

Para ilustrar essas ideias vamos discutir a formação de cristais moleculares. Essa é uma teoria adequada para a descrição de sólido de gases nobres, à exceção do He (vamos rever esse tópico novamente no curso. Aqui apresentamos uma abordagem qualitativa apenas). Como esses átomos possuem camadas eletrônicas fechadas, eles são fracamente deformados no estado sólido. O que mantém o sólido líquido são as forças dipolares de van der Waals. Embora neutros e quase esfericamente simétricos, esses átomos possuem um momento de dipolo $\vec{P}$:



O dipolo da partícula 1 gera um campo elétrico $E \propto P_1/r^3$ que se acopla com o dipolo da partícula 2: $P_2 = \alpha E \sim \alpha P_1/r^3$, $\alpha \rightarrow$ polarizabilidade do átomo. Há um ganho de energia da ordem $\Delta E \sim P_2 P_1/r^3 \sim \alpha P_1^2/r^6$ (dipolos alinhados)

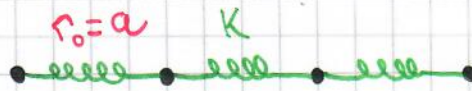
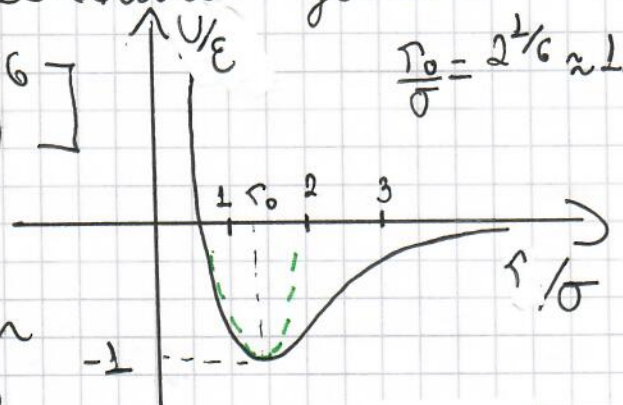
Sembre-se que $\langle P_1 \rangle = 0$, mas $\langle P_1^2 \rangle \neq 0$. A interação efetiva vem como $1/r^6$ (van der Waals). Como essa interação vale apenas para grandes distâncias, modelamos o comportamento de

curtas distâncias levando em conta a forte repulsão entre os núcleos, que sobrepõe a atração de van der Waals. Um modelo comum é o potencial de Lennard-Jones: ③

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

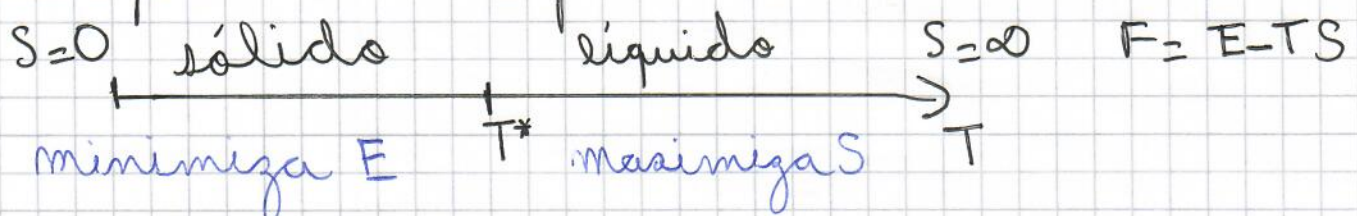
$$\frac{r_0}{\sigma} = 2^{1/6} \approx 1.12$$

Vemos que esse potencial possui um mínimo e que pode levar à formação de um cristal com separação $\sim r_0$ entre os átomos.



$$K = U''(r_0)$$

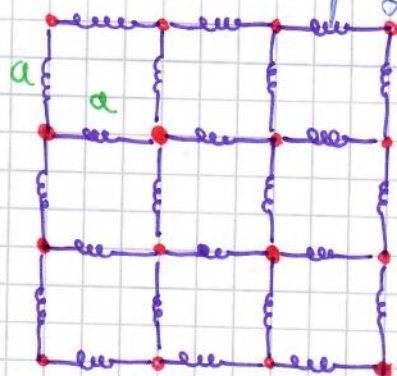
Vamos agora discutir como esse processo de cristalização ocorre de modo geral. Em altas temperaturas, as partículas possuem grande energia cinética e movem-se livremente em um gás. Na medida em que T é reduzida temos um estado líquido, no qual o potencial $U(r)$ já é sentido. Quando abacismos ainda mais T , U domina sobre a energia cinética e o sólido se forma. Vamos pensar agora nesse problema do ponto de vista de simetria.



A densidade em um gás ou líquido a altas temperaturas é uniforme e a probabilidade de encontrarmos uma molécula independe de sua posição no espaço. Dizemos que o líquido

é isotrópico e homogêneo. [Formalmente, há uma transição de fase entre gás e o líquido, com o líquido sendo mais denso. Contudo não há diferença de simetria e essa é a peça importante na discussão aqui]

Claramente, um cristal não é isotrópico e homogêneo, pois ele possui apenas simetrias discretas, como translação por um espaçamento de rede a .



Por ser invariante sob menos operações, dizemos que o cristal possui uma simetria menor que a do líquido. A transição do líquido para o cristal quebra a simetria do estado líquido, e a fase cristalina é comumente referida como estado de simetria quebrada.

Embora a translação de um cristal por uma distância menor do que a não o deixe invariante, essa operação não altera a energia do cristal. Há, portanto, um conjunto infinito de estados fundamentais cristalinos com a mesma energia. Na transição, um desses estados é selecionado espontaneamente, e por isso dizemos que há uma quebra espontânea de simetria. A quebra de uma simetria contínua deixa marca indelével no estado de baixa temperatura.

- Rigidez

(5)

Podemos tratar, em primeira aproximação, a energia potencial que liga os átomos em um sólido como aquela de um oscilador harmônico de constante de mola K :

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} K \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} K_B T \quad (\text{equipartição da energia})$$

$$\Rightarrow \langle x^2 \rangle = K_B T / K \quad (\ll a)$$

Se $K \rightarrow 0$ as flutuações na posição dos átomos divergem e o cristal é mal definido. Portanto a rigidez, $K \neq 0$, é uma condição necessária para a existência de periodicidade. Uma quebra de simetria contínua é geralmente associada a uma rigidez que protege a fase ordenada contra flutuações.

- Modos de Goldstone

Uma vez que a fase ordenada existe, podemos nos perguntar quais são suas excitações de baixa energia. No caso de um sólido, sabemos a resposta: são ondas sonoras para as quais $\omega = c q$, $q = 2\pi/\lambda$ e c é a velocidade do som. Elas correspondem a pequenos deslocamentos das molas que se propagam por toda a rede. A quantização desses modos normais dá origem a uma quase partícula, os fônons. Uma assinatura da quebra de simetria contínua é o aparecimento dessas excitações de baixa energia sem gap, conhecidos como modos de Goldstone.

- Escalas de energia

(6)

Para finalizar essa discussão introdutória, é útil olharmos para escalas de energia típicas do problema.

$$[\text{Raio de Bohr } a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \sim 0.53 \text{ \AA}]$$

• Distância característica: 1 angstrom $\text{\AA} = 10^{-10} \text{ m}$

• Energia eletrostática: $e^2 / (1 \text{ \AA}) \sim 14 \text{ eV} \sim 160.000 \text{ K}$

• Energia cinética para localizarmos um elétron em uma caixa com $l \sim 1 \text{ \AA}$:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (1/\text{\AA})^2 \sim 3.8 \text{ eV} \sim 44.000 \text{ K}$$

• Notem que $300 \text{ K} \sim 0.025 \text{ eV} = 25 \text{ meV}$!

• Claramente cristais iônicos como NaCl são bastante estáveis à temperatura ambiente.

• No caso do potencial de Lennard-Jones, $\epsilon \sim 0.01 \text{ eV}$ e esses cristais só ocorrem à baixas temperaturas