



- A prova possui duas questões. Sua solução deverá ser entregue no Moodle até as 23h00 do dia 14 de Dezembro de 2020 em formato PDF;
- Faça sua solução à caneta e de forma legível. É sua responsabilidade apresentar soluções claras e honestas;
- A consulta às suas anotações e livros texto é livre. Contudo, não vale conversar nem tirar dúvidas com os colegas. No caso de respostas idênticas, todos os envolvidos serão punidos igualmente;

1) Transporte e Semicondutores (5 pontos)

Considere a seguinte dispersão eletrônica

$$E(k_x, k_y, k_z) = \frac{\hbar^2}{2m} k_{\perp}^2 - 2t \cos(k_z a),$$

com $t > 0$ e $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$. Ou seja, temos uma dispersão do tipo partícula livre no plano $-xy$ e do tipo tight-binding para hopping entre diferentes planos.

(a) (1,5 ponto) Encontre o tensor massa efetiva para esse modelo ao redor dos pontos $(0, 0, 0)$ e $(0, 0, \pi/a)$. Calcule também a uma massa efetiva de ciclotron para $\mathbf{H} = H \mathbf{k}$ e discuta que resultado você esperaria para $\mathbf{H} = H \hat{\mathbf{k}}_{\perp}$.

(b) (1,5 ponto) Para fortes campos magnéticos $\mathbf{H} = H \mathbf{k}$, quais períodos em $1/H$ você espera que apareçam nas oscilações de de Haas-van Alphen? Você pode escrever sua resposta em termos de E_F e t , com E_F sendo a energia de Fermi. Assuma que $E_F > 2t$. Discuta seus resultados.

(c) (1,0 ponto) Experimentalmente, foi determinado que o gap do silício varia com a temperatura da seguinte forma

$$\Delta(T) = \left(1.17 - 4.73 \times 10^{-4} \frac{T^2}{T + 636} \right) \text{eV}.$$

Encontre a concentração de elétrons na banda de condução do Si intrínseco (sem dopagem) a uma temperatura de 77 K se $n(T = 300 \text{ K}) = 1.05 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$.

(d) (1,0 ponto) Desenhe o diagrama de bandas para uma junção p-n indicando as bandas de condução e valência, a energia de Fermi e a região de depleção. Explique qualitativamente como esse dispositivo pode ser utilizado para a retificação.

Solução:

(a) (1,5 ponto)

O tensor massa efetiva é definido como

$$(\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{k}))_{ij} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j},$$

o que nos leva a

$$(\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{k}))_{xx} = (\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{k}))_{yy} = 1/m \text{ e } (\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{k}))_{zz} = \frac{2ta^2}{\hbar^2} \cos(k_z a),$$

com todas as componentes não diagonais nulas. Temos assim

$$\mathbf{M}(0,0,0) = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & \hbar^2/2ta^2 \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{M}(0,0,\pi/a) = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar^2/2ta^2 \end{pmatrix}.$$

A massa efetiva de ciclotron é definida como

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial A(E, k_z)}{\partial E}.$$

Para um campo ao longo de \mathbf{k} as superfícies de energia constante no espaço recíproco são círculos de raio k_\perp .

$$E + 2t \cos(k_z a) = \frac{\hbar^2}{2m} k_\perp^2 = \text{constante} \implies A(E, k_z) = \pi \frac{2m}{\hbar^2} (E + 2t \cos(k_z a)),$$

e daí vem que $m^* = m$, que coincide com a resposta anterior. Esse não é o caso geral, contudo. Um campo na direção $\hat{\mathbf{k}}_\perp$ não precisa gerar uma massa efetiva similar àquela obtida por meio de medidas de transporte elétrico devido à estrutura de bandas ser mais rica ao longo da direção k_z , podendo inclusive gerar órbitas abertas para $E_F > 2t$.

(b) (1,5 ponto)

De acordo com a discussão em aula, as oscilações quânticas ocorrem com período

$$\Delta \left(\frac{1}{H} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar} \frac{1}{A_e(E_F)},$$

em que $A_e(E_F)$ é uma área extrema da superfície de Fermi, definida como

$$\frac{\partial A_e(E_F, k_z)}{\partial k_z} = 0.$$

No presente caso, a área da superfície de Fermi perpendiculares ao campo são simplesmente círculos de raio k_\perp e podemos escrever

$$A(E_F, k_z) = \pi k_\perp^2 = \pi (2m/\hbar^2) [E_F + 2t \cos(k_z a)].$$

Para $E_F > 2t$, k_z corre sobre todos os estados possíveis na 1ª BZ, ou seja a superfície de Fermi toca a borda da zona de Brillouin nessa direção. As áreas extremas ocorrem então para $k_z = 0$ e π/a e temos assim

$$\Delta_+ \left(\frac{1}{H} \right) = \frac{e\hbar}{m(E_F + 2t)} (k_z = 0) \text{ e } \Delta_- \left(\frac{1}{H} \right) = \frac{e\hbar}{m(E_F - 2t)} (k_z = \pi/a).$$

Esses são os dois períodos de oscilação que aparecem no problema. O fato de termos dois períodos fica claramente ligado ao fato de termos uma dispersão ao longo da direção z também, o que gera mais de uma área extrema. É interessante notar também que um campo aplicado ao longo das direções x ou y geraria órbitas abertas.

(c) (1,0 ponto)

Para um semiconductor intrínseco, temos $n(T) = p(T)$, e podemos escrever que

$$n(T) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{k_B T}{\pi \hbar^2} m^* m_{\text{buraco}}^* \right)^{3/2} e^{-\Delta(T)/2k_B T}.$$

Agora, calculamos a razão

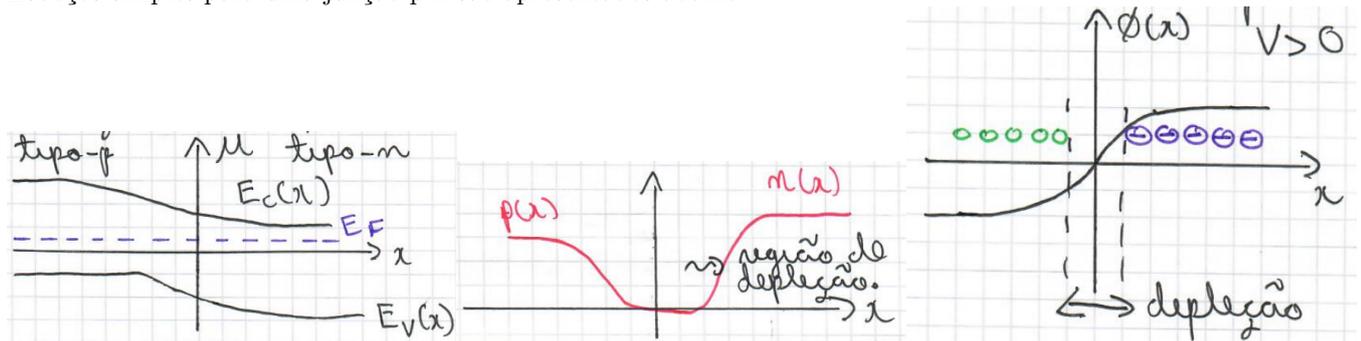
$$\frac{n(T_2)}{n(T_1)} = \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{\Delta(T_2)}{2k_B T_2} + \frac{\Delta(T_1)}{2k_B T_1} \right],$$

de modo que

$$n(77) = n(300) \times 2.5003 \times 10^{-30} = 2.625 \times 10^{-20} \text{ cm}^{-3}.$$

(d) (1,0 ponto)

Esboços simples para uma junção p-n são apresentados abaixo



Pontos chave:

- A energia de Fermi é a mesma ao longo de todo o material no equilíbrio;
- O fluxo de carga na interface gera um campo elétrico que distorce as bandas;
- Na interface, há a aniquilação de elétrons e buracos o que gera a região de depleção na qual a densidade de portadores é baixíssima;
- A baixa densidade de portadores gera uma alta resistência nessa região de depleção, que controlará a resistência de toda a amostra.
- Aplicando uma voltagem externa V podemos aumentar ou diminuir o potencial eletrostático na interface. Isso faz com que aumentemos ou diminuamos a extensão da região de depleção dependendo do sinal de V . Desse modo, a resistência desse dispositivo depende do sentido da corrente. Essa funcionalidade é conhecida como retificação.

2) Magnetismo (5 pontos)

(a) (1,5 ponto) Considere um gás diluído contendo N átomos magnéticos em uma caixa de volume V . A energia de interação de cada um desses átomos com um campo magnético \mathbf{B} aplicado é dada pela Hamiltoniana de Zeeman

$$\mathcal{H}_Z = g(JLS) \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{J} \cdot \mathbf{B},$$

em que μ_B é o magneton de Bohr, \mathbf{J} é o momento angular total do átomo e

$$g(JLS) = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \left[\frac{S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)} \right].$$

é o fator giromagnético efetivo. Aqui, L é o momento angular orbital total e S o spin total do átomo. Mostre que a susceptibilidade paramagnética desses sistema, a altas temperaturas, é dada pela lei de Curie

$$\chi = \frac{N \mu_0 \mu_{\text{eff}}^2}{V \hbar 3k_B T}.$$

Encontre o valor do momento magnético efetivo para esse átomo μ_{eff} . Discuta seus resultados.

(b) (1,0 ponto) Em muitos compostos interessantes, íons de Ce são trivalentes. Qual é o seu momento magnético efetivo? Explique se você espera que os resultados de íons livre valham para o íon de Cério dentro de um composto.

(c) (1,0 ponto) Muitos compostos à base de urânio são de grande interesse atual como Férmons Pesados ou Sistemas de Valência Mista. A primeira informação que gostaríamos de ter para estudá-los é qual seria a valência do urânio. Surpreendentemente é muito difícil decidirmos se temos U^{3+} ou U^{4+} . Uma maneira imediata de obter essa informação seria então medir a susceptibilidade desses compostos à altas temperaturas e extrair μ_{eff} . Assuma que tal medida experimental nos diga que $\mu_{\text{eff}} = 3.60\mu_B$ com 1% de erro relativo. Você consegue agora decidir se o estado de valência é U^{3+} ou U^{4+} ?

(d) (1,5 ponto) Um modelo muito útil para o estudo do magnetismo em sólidos é o modelo de Heisenberg com interações entre primeiros vizinhos

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j.$$

Aqui, J é o termo de interação magnética e \mathbf{S}_i representa o momento magnético efetivo no sítio i da rede. Qual é a origem microscópica mais geral desse termo de interação magnética? Discuta com detalhes um sistema para o qual você temos $J < 0$ (ferromagnético) e um para o qual observamos $J > 0$ (antiferromagnético).

Solução:

(a) (1,5 ponto)

Vamos assumir que os átomos permaneçam no estado fundamental como determinado pelas regras de Hund. Nesse caso temos $2J + 1$ estados degenerados e podemos escrever

$$z = Z^{1/N} = \sum_{J_z=-J}^J e^{-xJ_z/J} = e^x \sum_{m=0}^{2J} e^{-xm/J} = e^x \frac{1 - e^{-(2J+1)x/J}}{1 - e^{-x/J}} = \frac{e^{x(2J+1)/2J} - e^{-x(2J+1)/2J}}{e^{x/2J} - e^{-x/2J}} = \frac{\sinh[(x/2J)(2J+1)]}{\sinh[x/2J]},$$

com $x = \mu_B g(JLS) JB / \hbar k_B T$. A partir da função de partição, podemos calcular a energia livre. Como estamos interessados no limite de altas temperaturas, podemos considerar $x \rightarrow 0$. Para o cálculo da susceptibilidade, precisamos manter termos até ordem B^2 , o que nos dá

$$F = -k_B T \ln Z \approx -Nk_B T \ln \left[\frac{(x/2J)(2J+1) \left[1 + (x(2J+1)/2J)^2 / 3! \right]}{(x/2J) \left[1 + (x/2J)^2 / 3! \right]} \right],$$

$$F \approx -Nk_B T \left[\ln(2J+1) + (x(2J+1)/2J)^2 / 3! - (x/2J)^2 / 3! \right],$$

$$F \approx -Nk_B T \ln(2J+1) - N \frac{g^2 (2J+1)^2 \mu_B^2}{24 \hbar k_B T} B^2 + N \frac{g^2 \mu_B^2}{24 \hbar k_B T} B^2,$$

$$F \approx -Nk_B T \ln(2J+1) - N \frac{g^2 J(J+1) \mu_B^2}{6 k_B T} B^2.$$

Vemos que a energia livre diminui com B . Portanto, trata-se de uma contribuição paramagnética. A susceptibilidade é então dada por

$$\chi = -\frac{\mu_0}{V} \frac{\partial^2 F}{\partial B^2} = \frac{N}{V} \frac{\mu_0}{\hbar} \frac{\mu_{\text{eff}}}{3k_B T},$$

que é a lei de Curie com o momento magnético efetivo dado por

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_B g (JLS) \sqrt{J(J+1)}.$$

(b) (1,0 ponto)

A configuração eletrônica do Cério é $[\text{Xe}] 4f^1 5d^1 6s^2$. Isso quer dizer que o Ce^{3+} possui configuração $4f^1$. Pelas regras de Hund, temos então $S = 1/2$, $L = 3$ e $J = |L - S| = 5/2$. O fator de Landé é

$$g = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \left[\frac{3/4 - 12}{35/4} \right] = \frac{3}{2} - \frac{9}{14} = \frac{6}{7},$$

e o momento efetivo

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_B \frac{6}{7} \sqrt{\frac{35}{4}} = 2.535 \mu_B.$$

Esperamos que esse resultado continue válido para o íon de Cério embebido em um sólido por dois motivos: (i) tanto a repulsão Coulombiana quanto a interação spin-órbita são bem pronunciadas em Terras Raras, o que respeita a hierarquia de energia embutida nas regras de Hund; (ii) a função de onda $4f$ é fortemente localizada nas proximidades do núcleo. Por isso, os efeitos do campo cristalino também são bastante suprimidos. Isso novamente valida as regras de Hund.

(c) (1,0 ponto)

A configuração eletrônica do Urânio é $[\text{Rn}] 5f^3 6d^1 7s^2$. Isso quer dizer que o U^{3+} possui configuração $5f^3$ e que o U^{4+} possui configuração $5f^2$. Pelas regras de Hund, temos, respectivamente, $S = 3/2$, $L = 6$, $J = |L - S| = 9/2$ e $S = 1$, $L = 5$, $J = |L - S| = 4$. Os fatores de Landé são

$$g = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \left[\frac{15/4 - 42}{99/4} \right] = \frac{3}{2} - \frac{153}{198} = \frac{8}{11},$$

$$g = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \left[\frac{2 - 30}{20} \right] = \frac{3}{2} - \frac{7}{10} = \frac{4}{5},$$

e os momentos efetivos

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_B \frac{8}{11} \sqrt{\frac{99}{4}} = 3.62 \mu_B \quad (\text{U}^{3+}) \quad \text{e} \quad \mu_{\text{eff}} = \mu_B \frac{4}{5} \sqrt{20} = 3.58 \mu_B \quad (\text{U}^{4+}).$$

Vemos, portanto, que a precisão experimental de 1% não nos permite distinguir entre esses dois estados de valência. Outras sondas experimentais são necessárias.

(d) (1,5 ponto)

O termo de troca magnética dá a interação entre os momentos magnéticos nos sólidos. Uma primeira abordagem sugeriria que sua interação seria a interação dipolar entre esses momentos. Contudo, essa interação é tipicamente muito fraca, com uma escala da ordem de 1 K. Na verdade, J possui uma origem eletrostática: ela é fruto de uma combinação da repulsão Coulombiana entre os elétrons (que não depende do spin) com a antissimetria da função de onda, como ditada pelo princípio de Pauli, que introduz a dependência com o spin.

Sabemos que um $J < 0$, favorecendo o alinhamento dos momentos, ocorre em sistemas nos quais os estados orbitais atômicos que as partículas ocupam são ortogonais. Isso ocorre porque não há overlap entre eles e alinhar os spins não só satisfaz o princípio de Pauli como minimiza a repulsão Coulombiana, uma vez que garante de a função de onda de dois elétrons possua amplitude nula para $\mathbf{r} = 0$, com \mathbf{r} sendo a coordenada relativa entre os elétrons. Essa é a origem microscópica das duas primeiras regras de Hund para átomos isolados.

Já $J > 0$, favorecendo o antialinhamento dos momentos, ocorre em sistemas nos quais os estados orbitais atômicos que as partículas ocupam não são ortogonais. Isso ocorre porque agora existe uma probabilidade finita de que elétrons pertencentes a esses orbitais ocupem o mesmo lugar no espaço. Por isso, o princípio de Pauli dita que eles possuam spins opostos. A repulsão Coulombiana é minimizada ao forçarmos os elétrons a ocuparem diferentes orbitais. Em um caso de semipreenchimento, podemos ter então um isolante, o isolante de Mott, se a repulsão Coulombiana for forte o suficiente para superar o ganho de energia cinética advindo da formação de uma banda metálica. Consequentemente, isolantes de Mott apresentam, geralmente, um estado fundamental antiferromagnético.