

Introdução à Física do Estado Sólido

Física Moderna II-B

Caetano R. Miranda **AULA 22 – 10/11/2022**

Carlos A. Martins Jr.



sampa



crmiranda@usp.br

Cronograma - revisado

CRONOGRAMA TENTATIVO - Introdução à Física do Estado Sólido - Física Moderna IIB - 2S 2022					
DATA	aula n°	Segundas (19h - 21h) - Sala 2001 - Ala Central	aula n°	Quartas (21h - 23h) - Sala 2001 - Ala Central	DATA
15-Aug			1	Apresentação - Curso	18-Aug
22-Aug	2	Revisão - Partículas e ondas - Chocolate	3	Átomos e Ions (Elétrons em átomos) - Tabela Periódica	25-Aug
29-Aug	4	Átomos e Ions (Elétrons em átomos) - Simulação	5	Moléculas e sólidos (Elétrons em sólidos) - impressão 3D	01-Sep
05-Sep	Feriado	Independência do Brasil. Não haverá aula.	Feriado	Independência do Brasil. Não haverá aula.	08-Sep
12-Sep	6	Ordem e Simetria	7	Ondas em cristais – Estruturas cristalinas - Corte/Colar - Origem	15-Sep
19-Sep	8	Estruturas - Átomos em cristais - VR1	9	Estruturas - Átomos em cristais - VR2	22-Sep
26-Sep	10	Oficina - Construção Oculus VR	11	BNCC & Wikipédia	29-Sep
03-Oct	12	Vibrações térmicas e Fonons	13	Vibrações térmicas e Fonons	06-Oct
10-Oct	14	Elétrons livres	15	Elétrons livres	13-Oct
17-Oct	16	Condutividade elétrica e teoria de bandas	17	Condutividade elétrica e teoria de bandas	20-Oct
24-Oct	18	Semicondutores	19	Semicondutores	27-Oct
31-Oct	20	Junção PN - Criação Jogos	21	Junção PN	03-Nov
7/11	22	Magnetismo	23	Magnetismo	10-Nov
14/11	Feriado	Dia - República. Não haverá aula.	24	Projeto - Escolha do Tema / Oficina - Infográfico	17-Nov
21/11	25	Supercondutividade	26	Supercondutividade	24-Nov
28/11	27	Nanotecnologia	27	Materiais quânticos	01-Dec
05-Dec	29	PROJETO - Acompanhamento	30	Projeto - Acompanhamento	08-Dec
12-Dec	31	PROJETO	32	PROJETO	15-Dec

Material baseado no:

Capítulo 7 do Kittel (*Introduction to Solid State Physics – 8ª edição*)

Capítulos 7 e 8 do Rosenberg (*The Solid State – 3ª edição*)

Capítulo 10 – Física Moderna – Paul A. Tipler & Ralph A. Llewellyn

Entrega III – Duplas - Entrega 27/11/2022 – 23:59

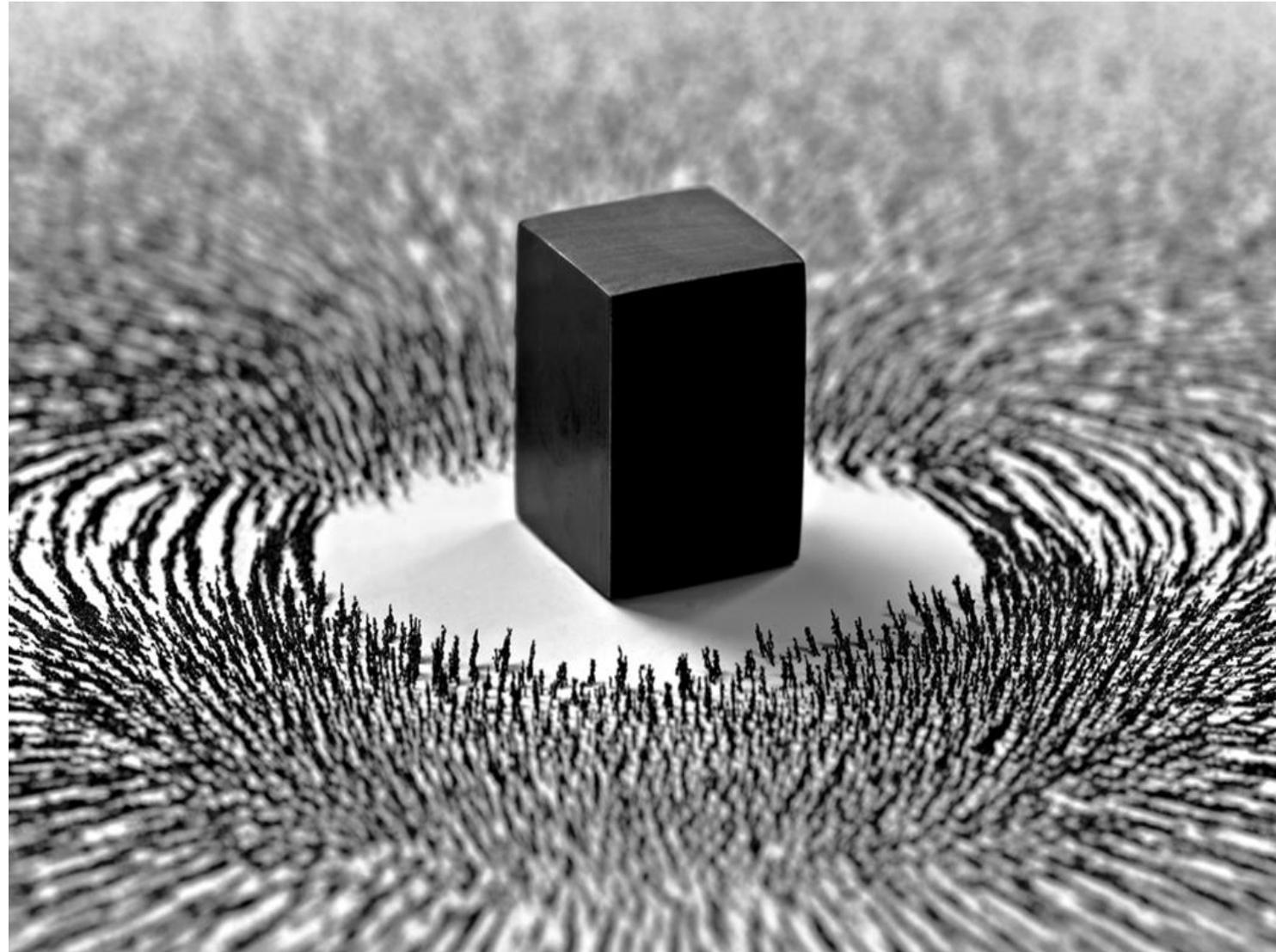
1. Junção PN - Diodo
2. Laser
3. CCD
4. Disco Rígido
5. LED
6. Transistor
7. Célula Solar
8. Baterias
9. Célula Combustível
10. Chip computador
11. Smartphone
12. Magnetos
13. Supercondutores
14. Nanotecnologia

Projeto (apresentações em 12 e 15/12/22)

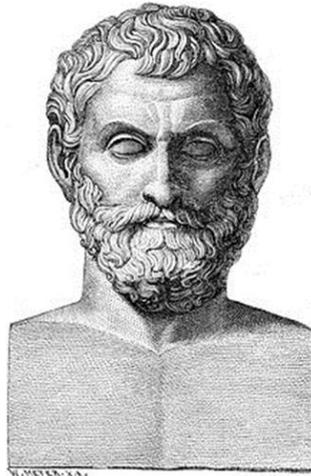
- Desenvolvimento de um plano de aula alinhado à BNCC sobre temas em torno da Física do Estado Sólido
- Desenvolvimento de objetos de aprendizagem
- Ciênciarte (apresentação e protocolo performance)
- Divulgação científica (podcast, vídeo, ...)



Magnetismo



Magnetismo



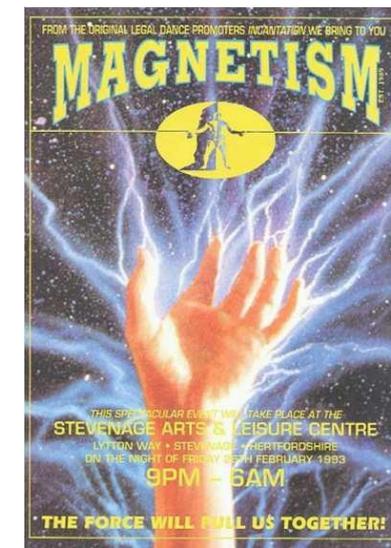
Tales of Mileto



Magnetita na Magnesia : etimologia do magnetismo



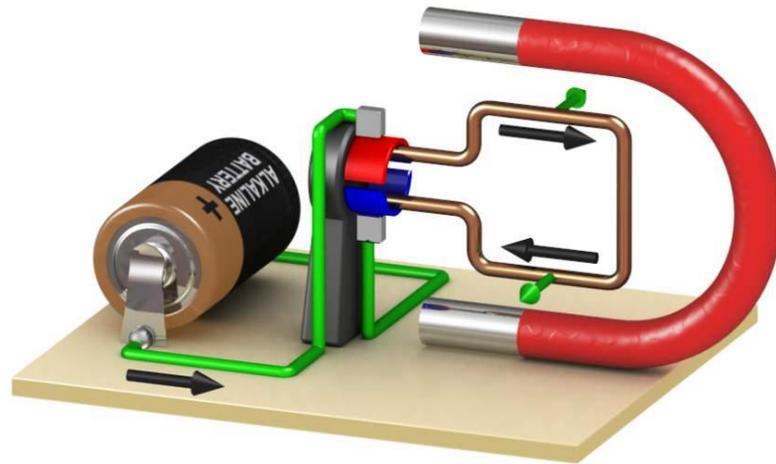
Bússola chinesa em magnetita(magnetite, Fe_3O_4)



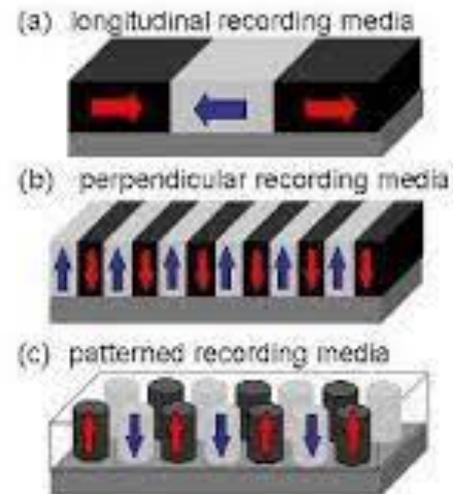
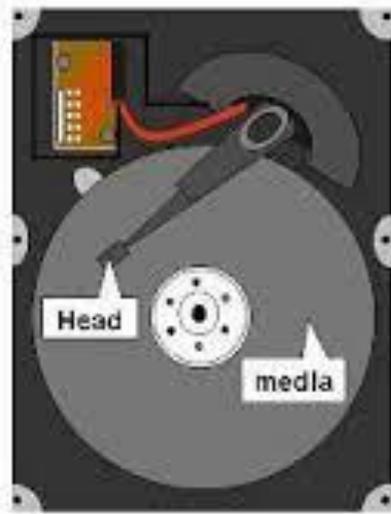
Até o final do século 18, o magnetismo ainda era totalmente inexplicável

Magnetismo - aplicações

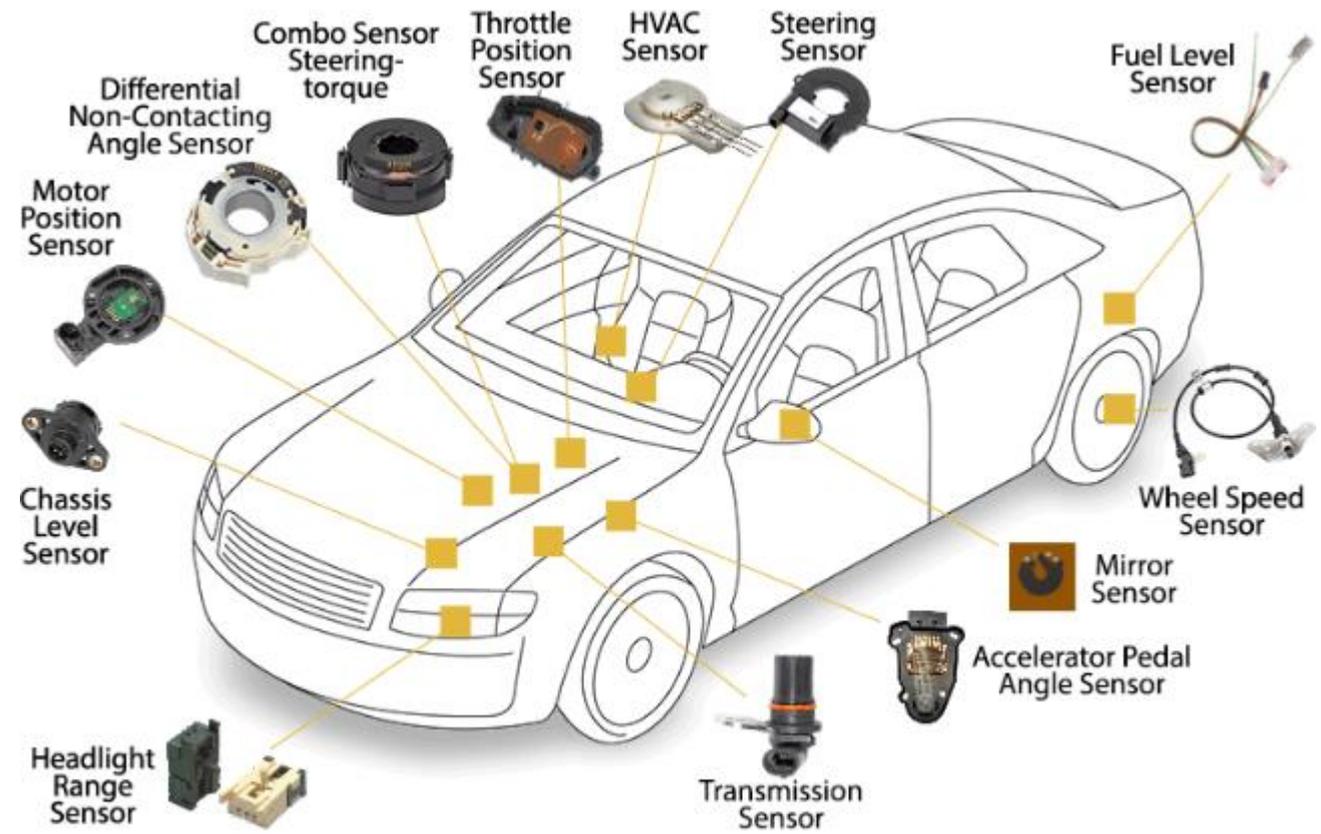
Motores



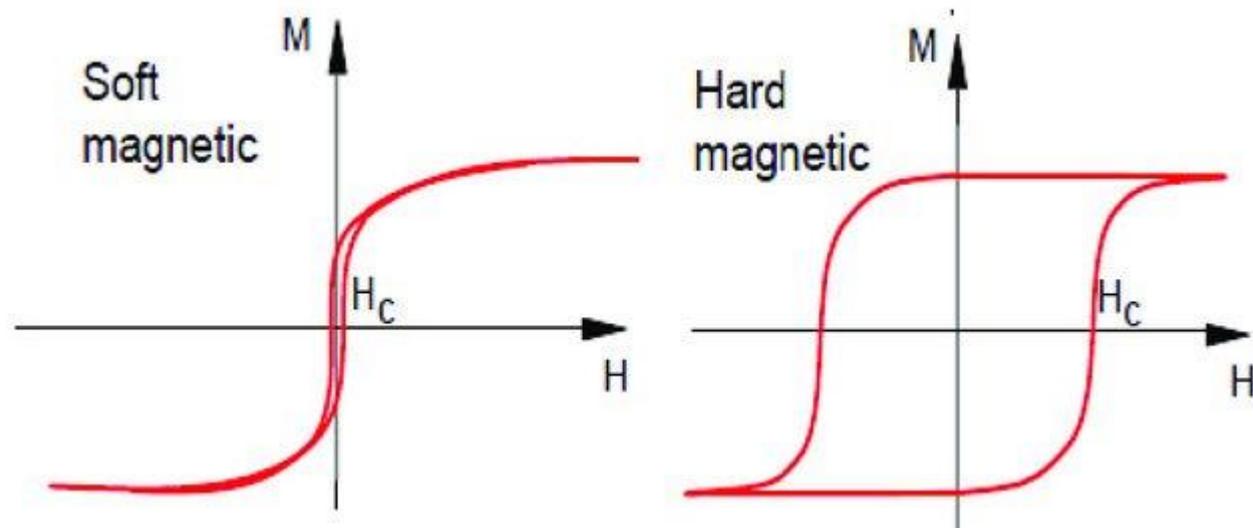
Gravação Magnética



Sensores

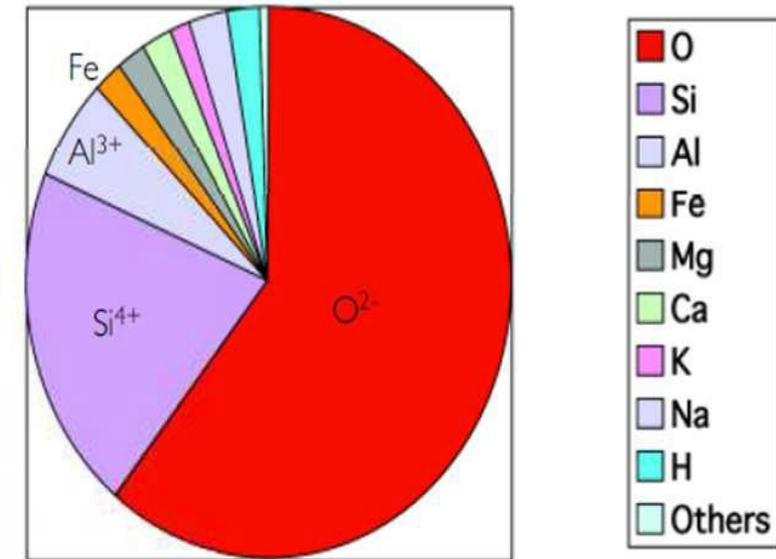
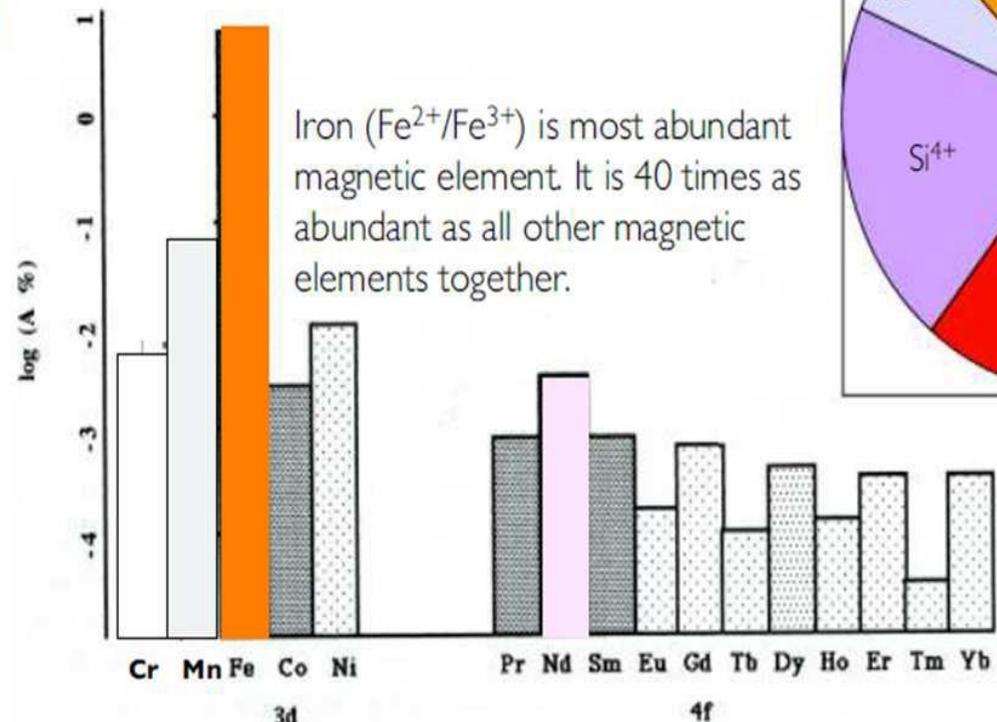


Magnetismo - aplicações



Abundância dos materiais

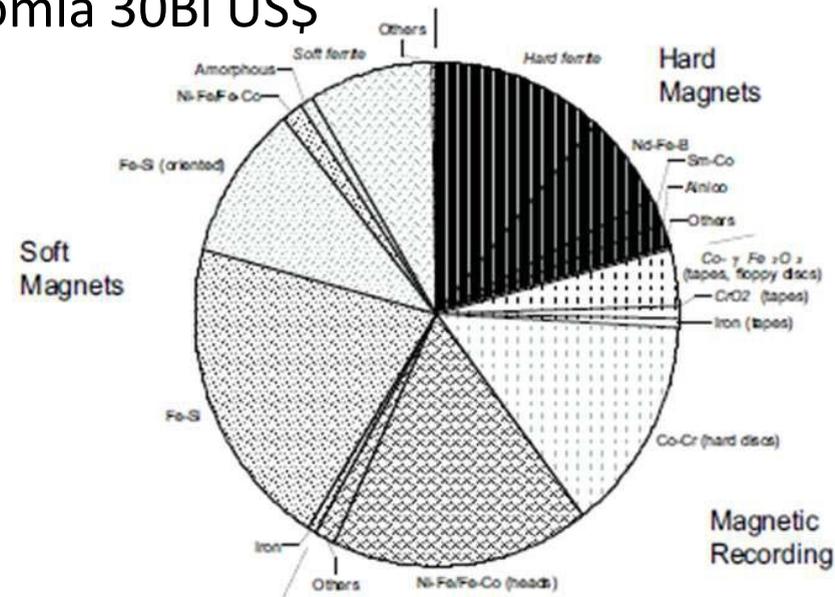
Abundances of magnetic ions in the Earth's crust



Composition in atomic % of the Earth's crust. Iron (Fe^{2+}/Fe^{3+}) is the fourth most abundant element.

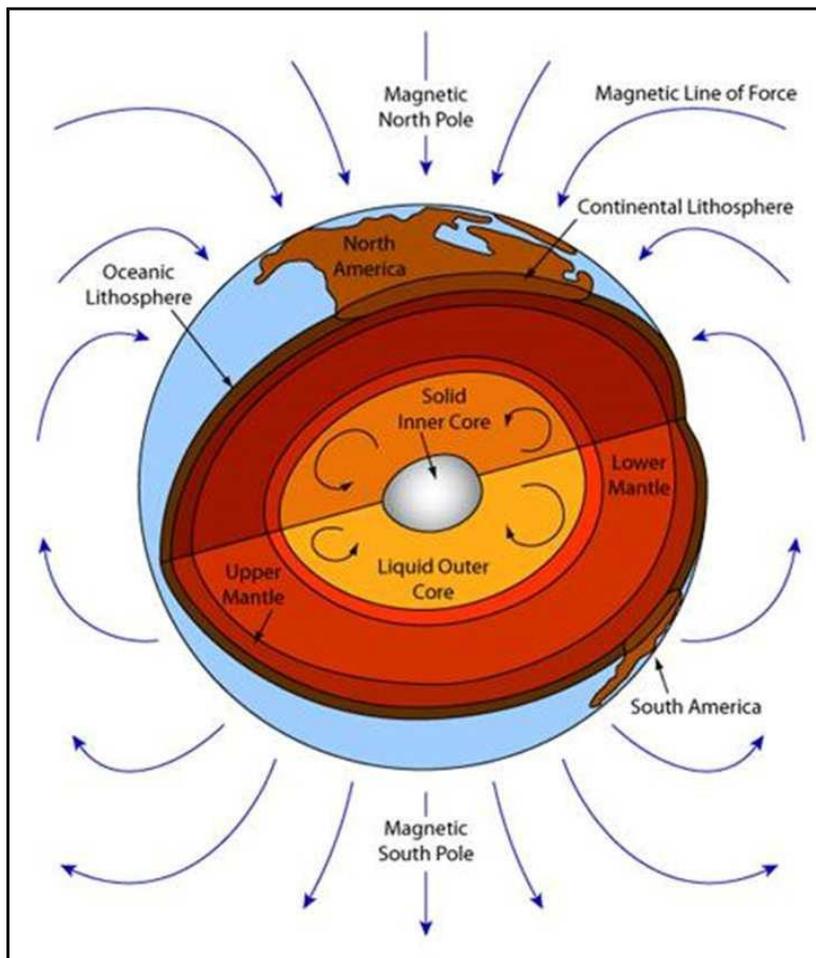
Price scales roughly inversely with abundance.

Economia 30Bi US\$

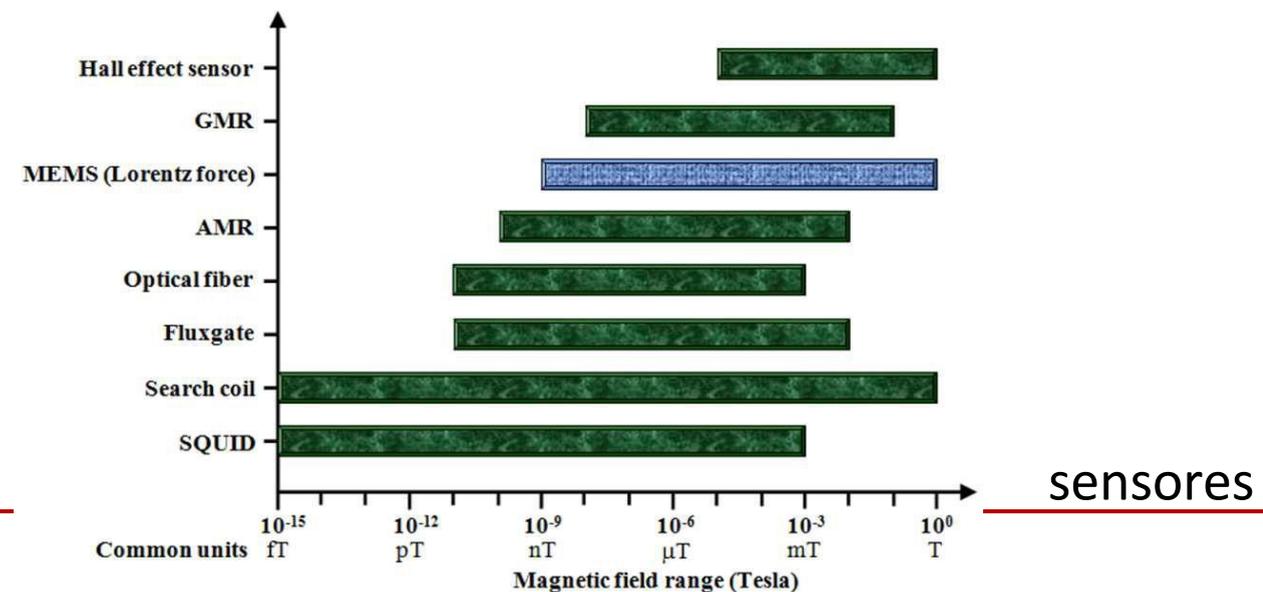


Magnetismo - aplicações

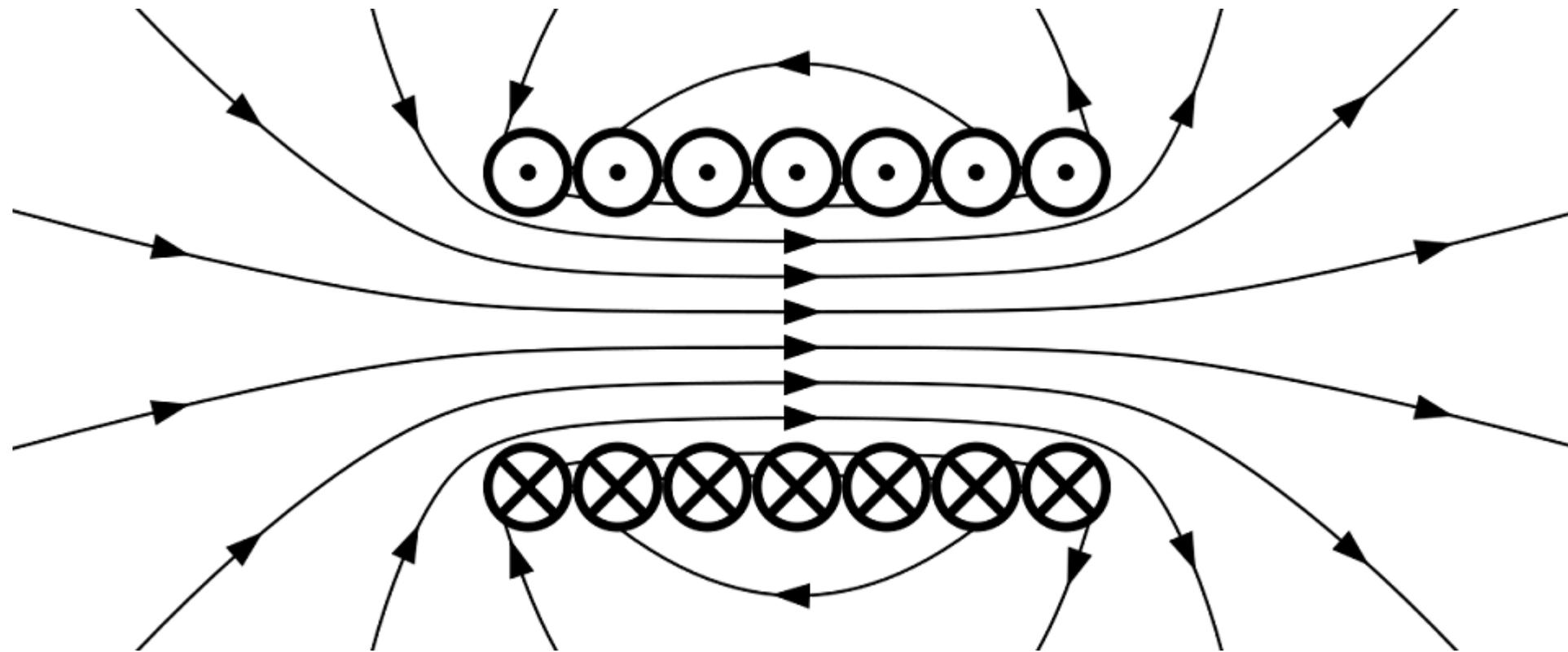
A Terra se comporta como um ímã
(magneto-hidrodinâmica)



Source	Approximate Magnetic Field Strength
Neuron depolarization (imaged by MEG)	0.5 pT (5×10^{-13} T)
Earth's magnetic field	0.5 G (50 μ T)
Refrigerator magnet	50 G (5 mT)
Junkyard electromagnet	1 T
Clinical MRI scanners	0.5 - 3.0 T (typical)
Research MRI scanners (human)	7.0 T - 11.7 T
Laboratory NMR spectrometers	6 - 23 T
Largest pulsed field created in lab nondestructively	97 T
Largest pulsed field created in lab (destroying equipment but not the lab)	730 T



Conceitos básicos



Magnetização:

$$\mathbf{M} = \frac{d\mathbf{m}}{dV}$$

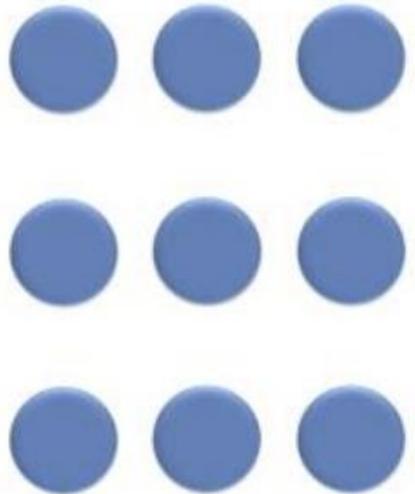
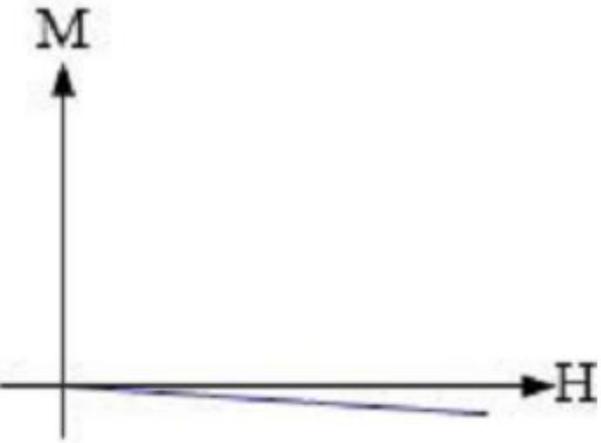
Momento magnético elementar

Volume

Suscetibilidade: medida de quanto um material se tornará magnetizado em um campo magnético aplicado.

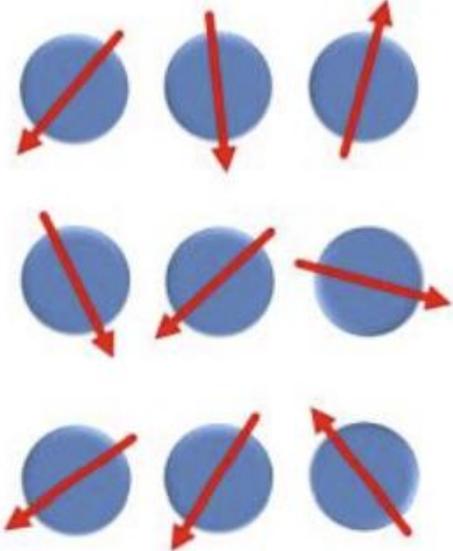
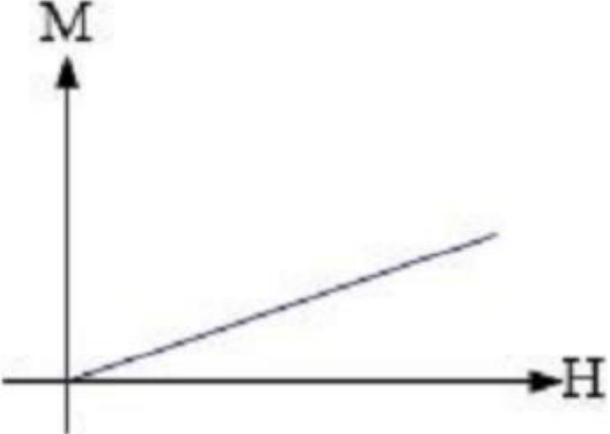
É a razão da **magnetização** M (momento magnético por unidade de volume) pela intensidade do campo de magnetização aplicado H .

Tipos de Magnetismo

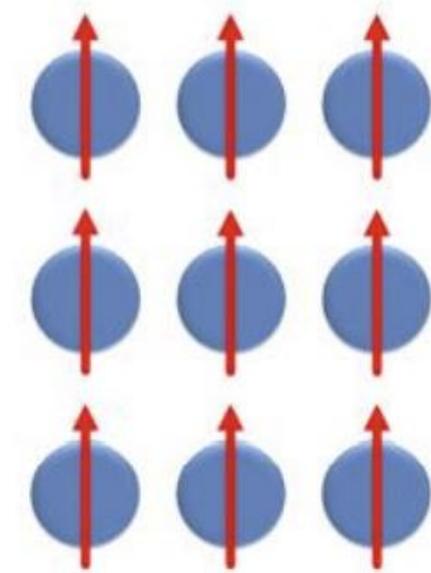
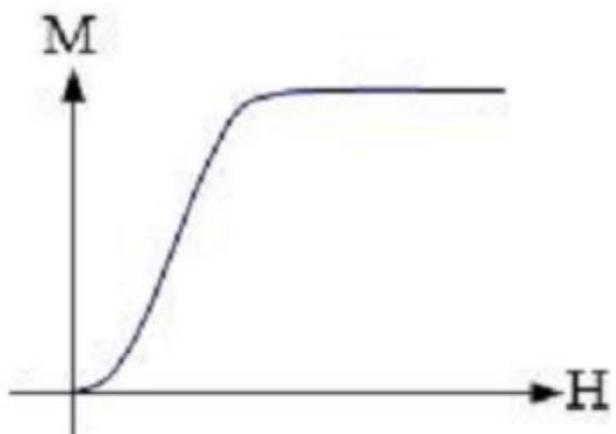
Type	Example	Atomic / Magnetic behavior		
Diamagnetism	Inert gases; many metals Au, Cu, Hg; non-metallic elements B, Si, P, S; ions Na ⁺ , Cl ⁻ ; molecules H ₂ , N ₂ ; H ₂ O	Atoms have no magnetic moment. Susceptibility is small and negative, -10^{-6} to -10^{-5}		

medida de quanto um material se tornará magnetizado em um campo magnético aplicado. É a razão da magnetização M (momento magnético por unidade de volume) para a intensidade do campo de magnetização aplicado H .

Tipos de Magnetismo

<p>Paramagnetism</p>	<p>Some metals Al, some diatomic gases O₂, NO; ions of transition metals and rare earth metals; rare earth oxides</p>	<p>Atoms have randomly oriented magnetic moments. Susceptibility is small and positive, 10^{-5} to 10^{-3}</p>		
----------------------	--	--	---	---

Tipos de Magnetismo

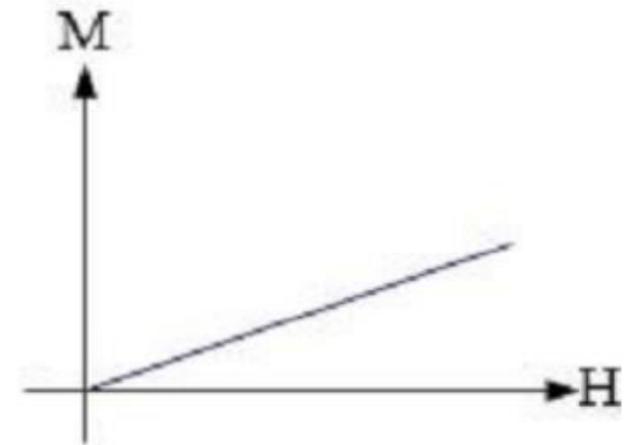
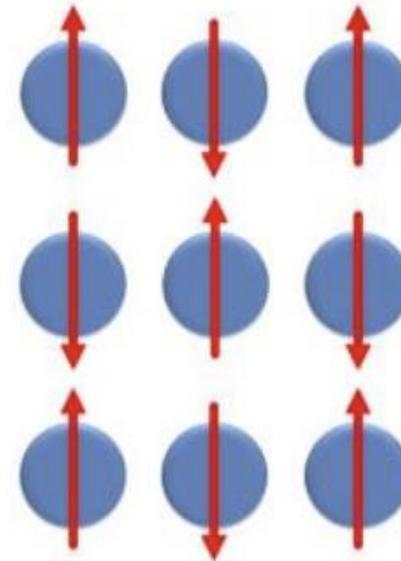
Ferromagnetism	Transitions metals Fe, H, Co, Ni, alloys of ferromagnetic elements; some alloys of Mn, MnBi, Cu ₂ MnAl	Atoms have parallel aligned magnetic moments. Susceptibility is large (below T_c)	 A diagram showing a 3x3 grid of blue circles representing atoms. Each circle has a red arrow pointing vertically upwards, indicating that all magnetic moments are parallel and aligned in the same direction.	 A graph showing the relationship between magnetization (M) on the vertical axis and magnetic field strength (H) on the horizontal axis. The curve starts at the origin, rises steeply, and then levels off to a horizontal line, representing a saturation magnetization.
----------------	---	---	--	---

Tipos de Magnetismo

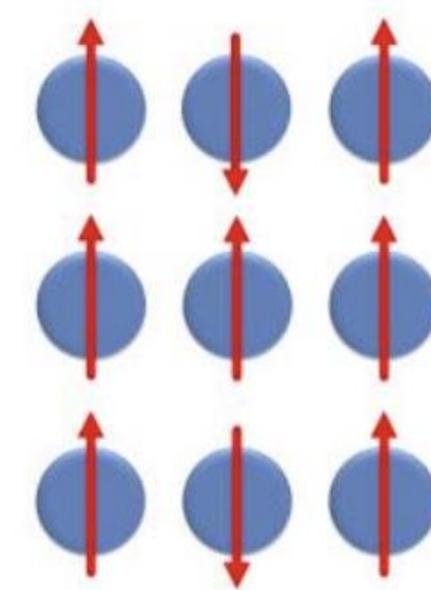
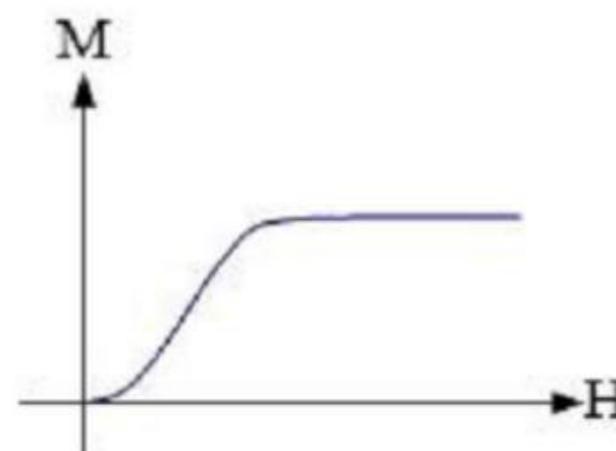
Anti-ferromagnetism

Transition metals
Mn, Cr and many
of their
compounds,
MnO, CoO, NiO,
Cr₂O₃, MnS,
MnSe

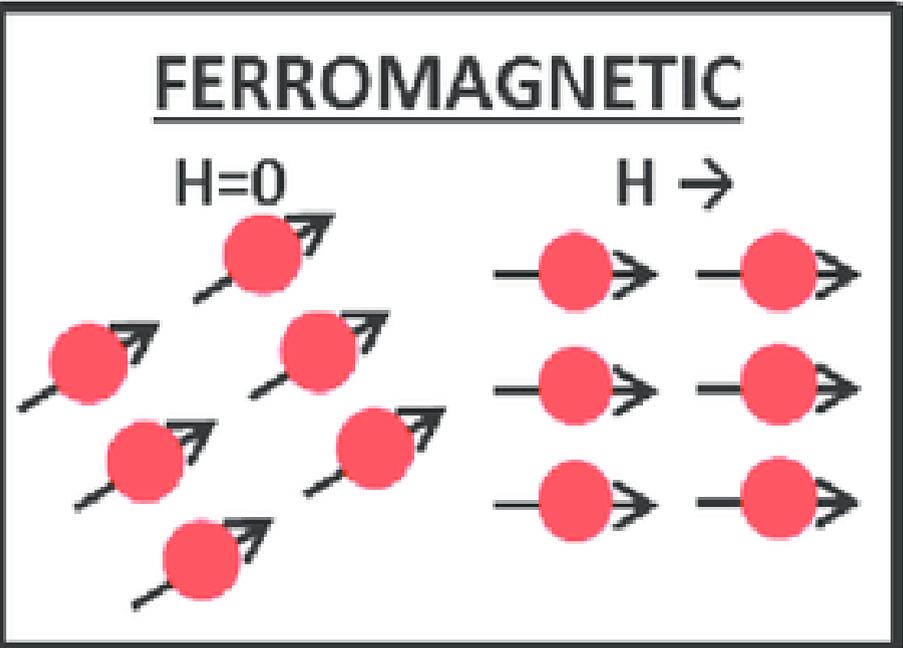
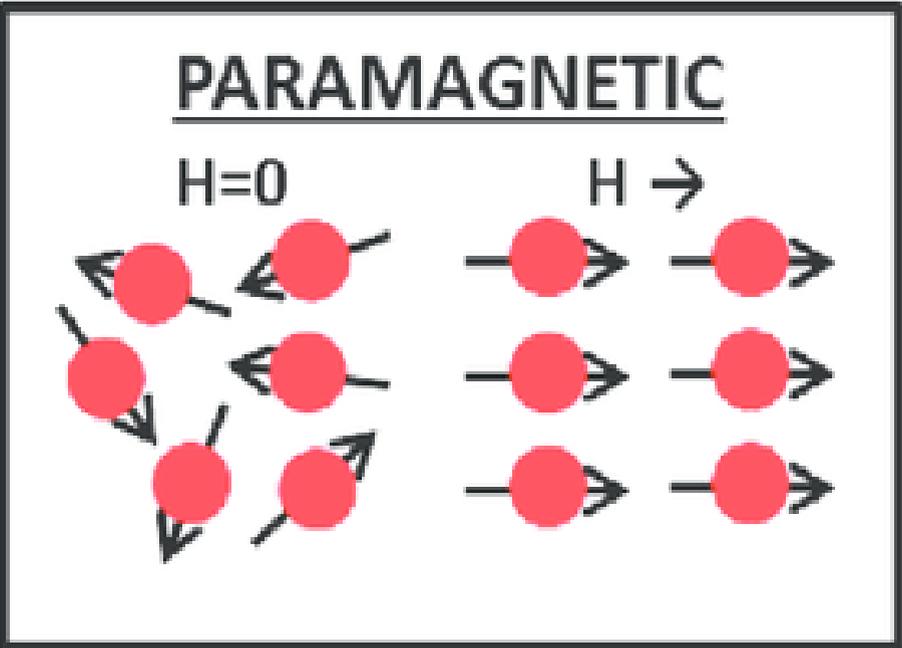
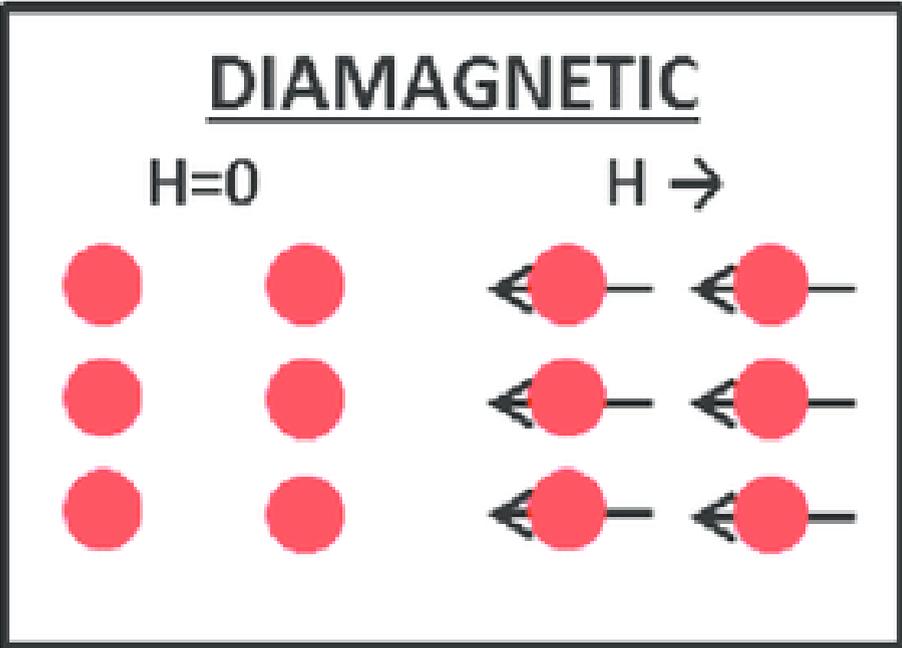
Atoms have
antiparallel
aligned magnetic
moments.
Susceptibility is
small and positive
 10^{-5} to 10^{-3}



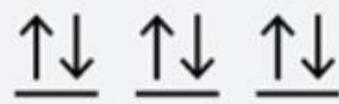
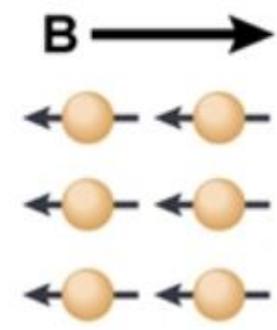
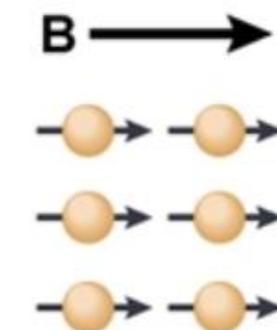
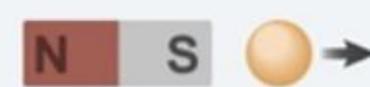
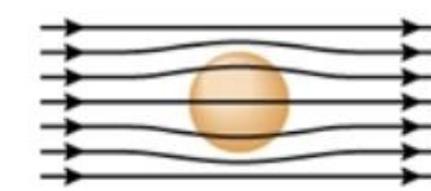
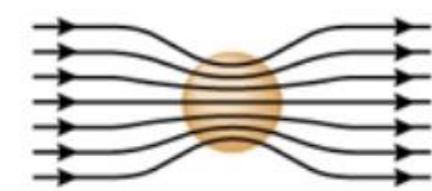
Tipos de Magnetismo

<p>Ferrimagnetism</p>	<p>Fe_3O_4 (magnetite); mixed oxides of iron and other elements such as Sr ferrite</p>	<p>Atoms have mixed parallel and antiparallel aligned magnetic moments. Susceptibility is large (below T_c)</p>	 <p>The diagram shows a 3x3 grid of blue circles representing atoms. Each atom has a red arrow indicating its magnetic moment. The arrows in the first and third columns point upwards, while the arrows in the second column point downwards. This illustrates the mixed parallel and antiparallel alignment characteristic of ferrimagnetism.</p>	 <p>The graph shows the magnetization (M) versus the magnetic field (H). The vertical axis is labeled 'M' and the horizontal axis is labeled 'H'. The curve starts at the origin (0,0), rises steeply, and then levels off to a constant value, representing a saturation magnetization. This is typical of a ferromagnetic or ferrimagnetic material below its Curie temperature.</p>
-----------------------	---	--	---	---

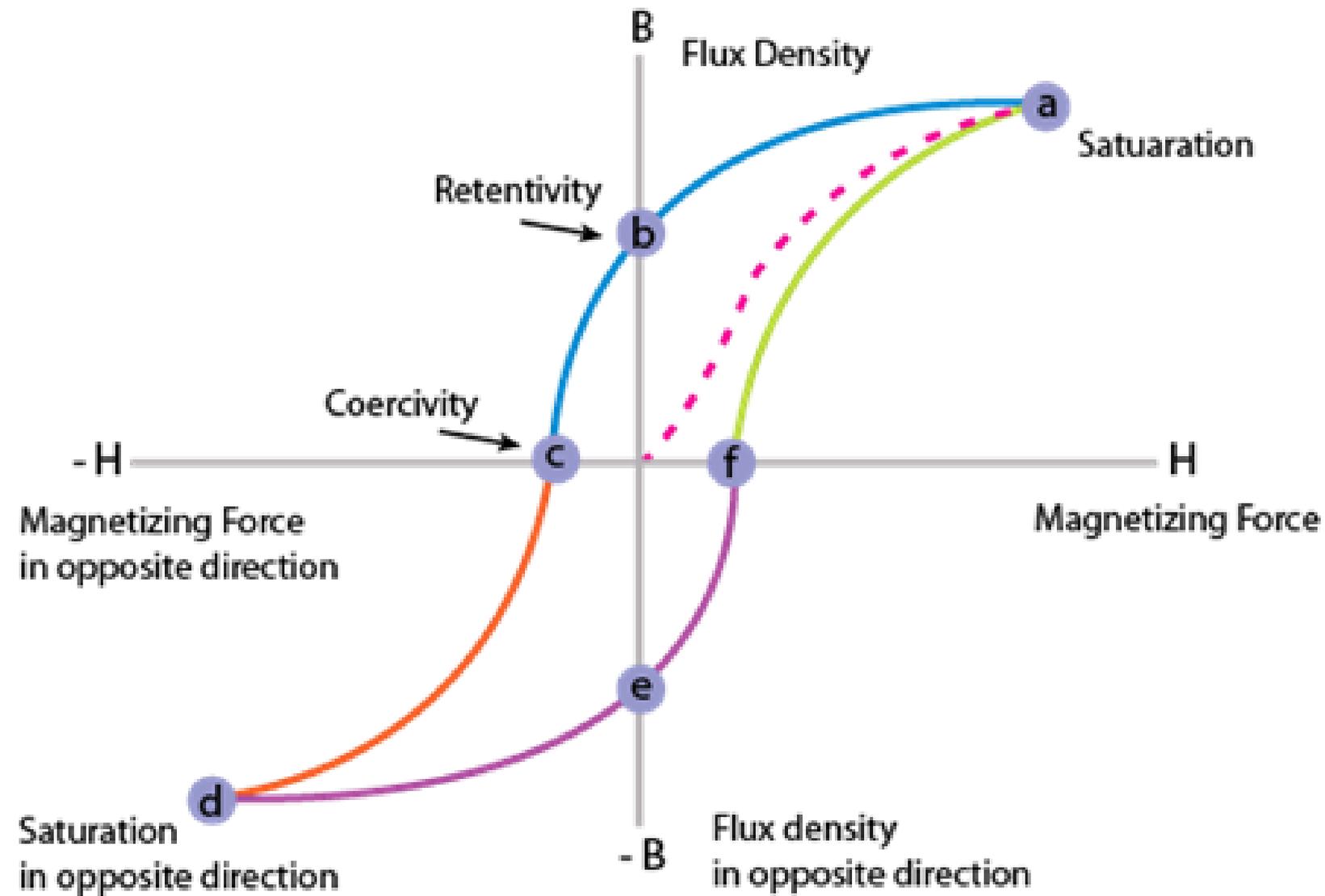
Tipos de magnetismo



Types of magnetism

	Diamagnetic	Paramagnetic
Electron pairing	 No unpaired electrons	 At least one unpaired electron
Spin alignment with magnetic field B	 Anti-parallel	 Parallel
Reaction to magnets	 Very weakly repelled	 Attracted
Effect on magnetic field lines	 Field bends slightly away from the material	 Field bends toward the material

Histerese



Modelo de Ising

Modelo de Ising e sua extensão a Materiais

- Hamiltoniano do sistema é dado por:

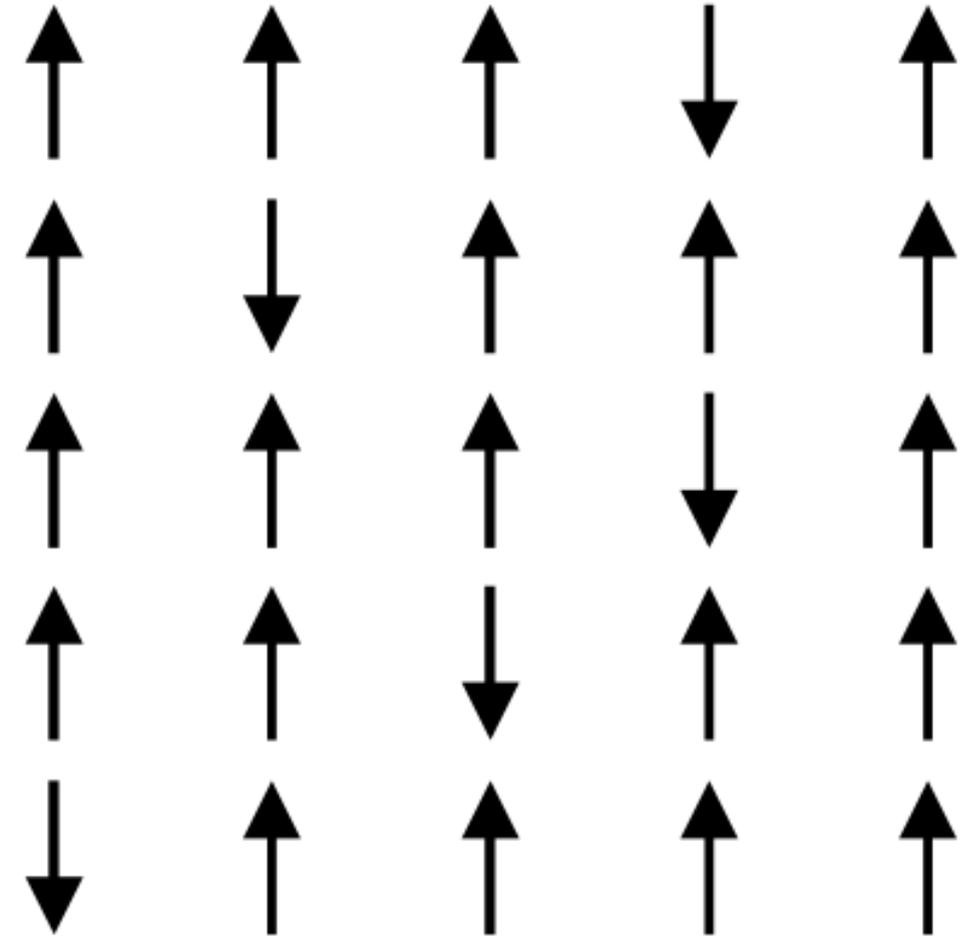
$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i$$

Onde $s_i = \pm 1$, $i = 1, \dots, N$

$\langle ij \rangle$ = soma de todos os pares de spins (1^{os} viz.)

J = constante de acoplamento

h = campo magnético externo



Modelo de Ising

- Modelo de rede
 - Um dos mais simples modelos de sistemas com graus de liberdade interagentes, porém não trivial
 - Introduzido por Lenz e Ising para modelar transições de fase em materiais magnéticos (~ 1920)
 - Resolvido exatamente em 2D por Onsager (Nobel 1968)
 - 3D ainda não resolvido analiticamente
-

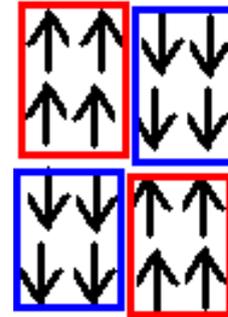
Modelo de Ising

- Bastante útil em Física da Matéria Condensada, Teoria de Campo e Ciência dos Materiais
 - Modelo para magnetismo (não muito sofisticado)
 - Usado como modelo para ligas binárias em Ciência dos Materiais
 - Usado para modelar partículas adsorventes em Superfícies
 - Pode ser estendido em diversas direções e situações.
-

Ferromagnetismo

Domínios magnéticos de um material se alinham em uma direção

Em geral, os domínios não se alinham
→ nenhuma magnetização macroscópica

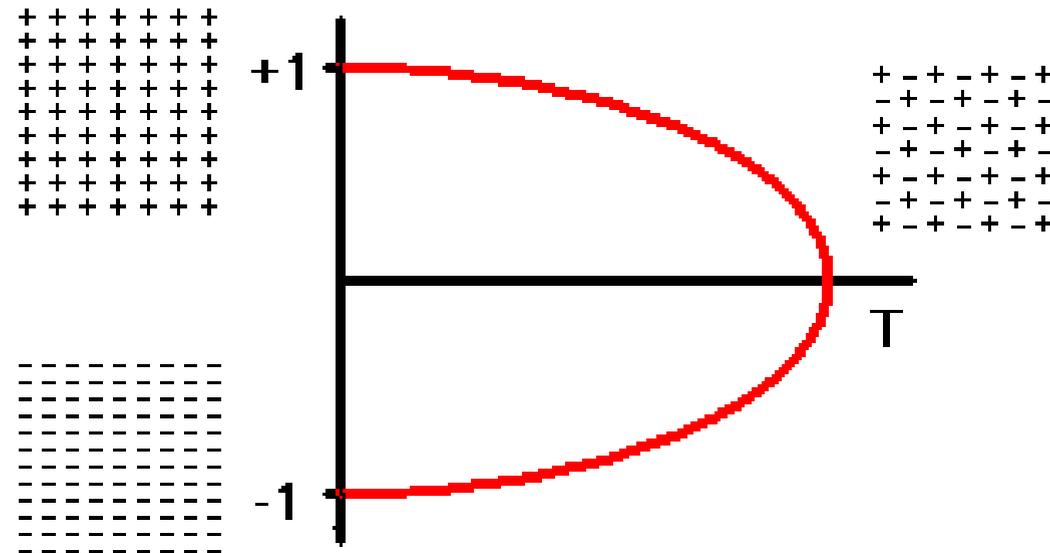


Podem ser obrigados a alinhar-se em uma direção



Configuração de menor energia, em T baixas

→ todos spins alinhados → 2 configurações (up e down)



Temp de Curie - temperatura onde o ferromagnetismo desaparece

Fe: 1043 K

Ponto Critico

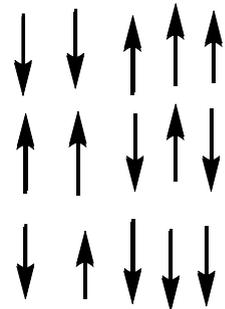
→ Transição de fase de 2 ordem

Modelos

Classe de universalidade - grande classe de sistemas cujas propriedades são independentes dos detalhes dinâmicos do sistema

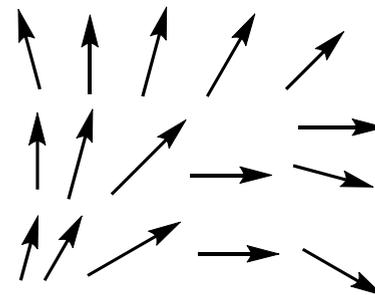
**Modelo de Ising–
Vetores apontam
APENAS
UP OU DOWN**

→ Modelo mais simples



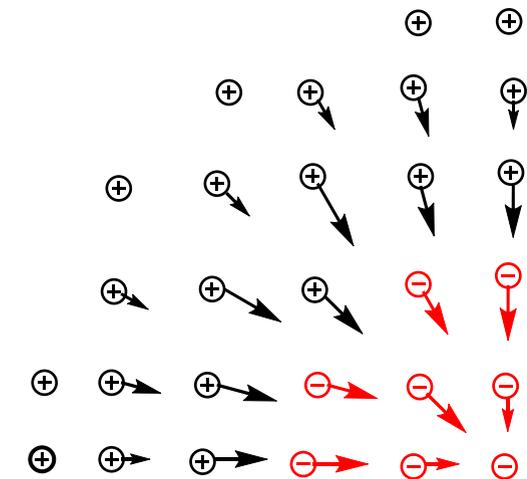
- Ligas binárias
- Misturas líquidas binárias
- Gás-líquido (átomos e vacâncias)

Modelo de Potts -
vetores apontam
em qualquer direção
Em um plano



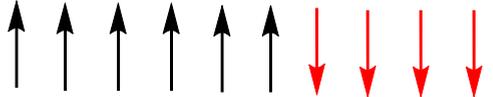
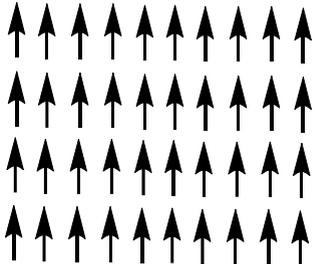
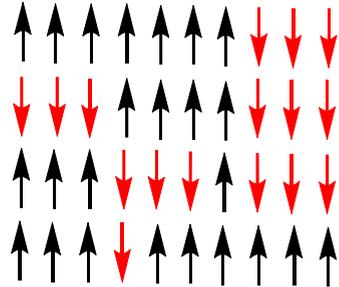
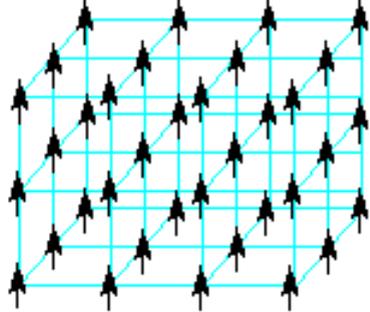
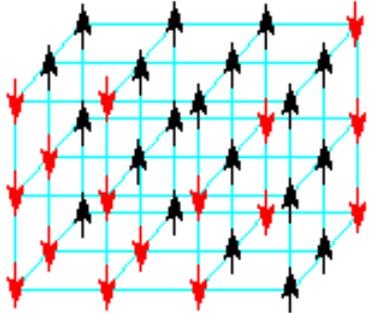
- Hélio superfluido
- Metais supercondutores

Modelo de Heisenberg -
vetores apontam em
qualquer direção
NO ESPAÇO



Dimensionalidade distinta → classe de universalidade diferente

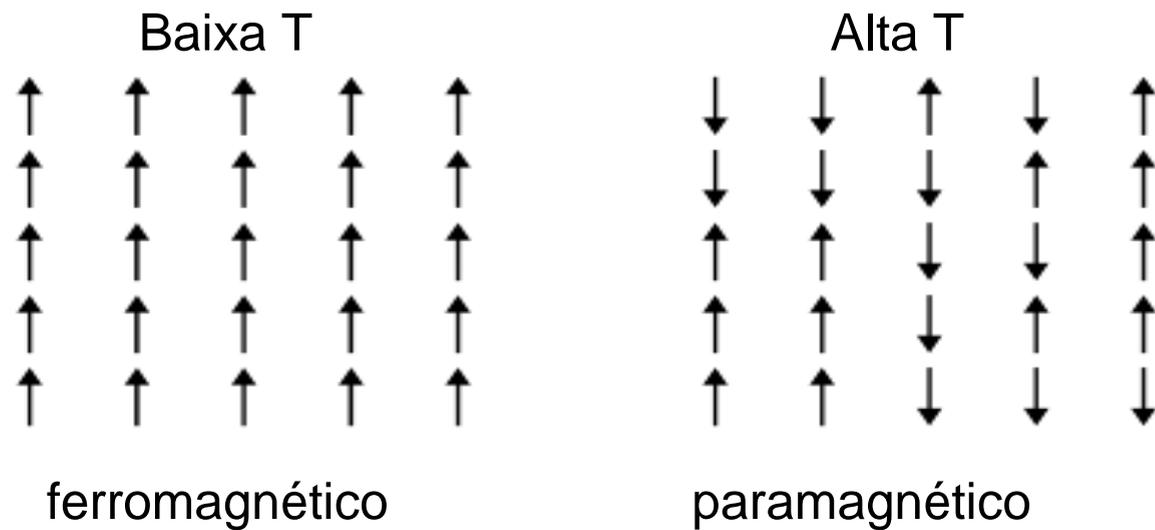
Ising Model

	Low T	High T	Solução
1-D			Ising – 1925
2-D			Onsager – 1944
3-D			Provado ser Computacionalmente Intratável - 2022

Com o aumento de T, aumenta-se S, mas magnetização líquida diminui

Modelo de Ising

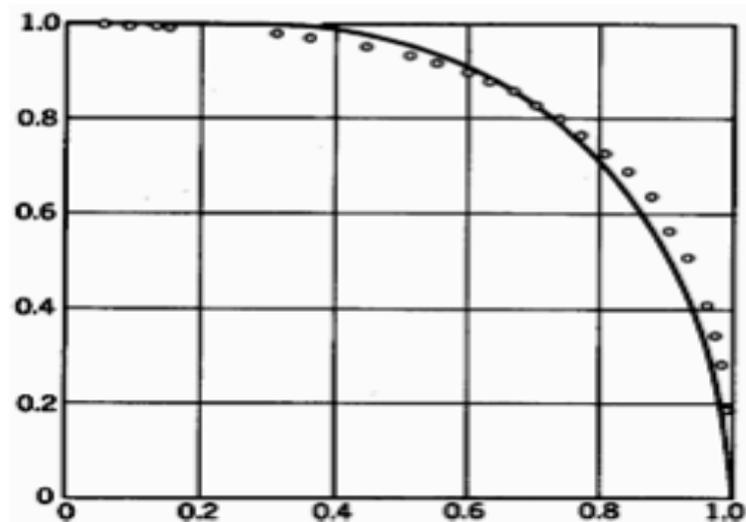
Material Ferromagnético



ferromagnético

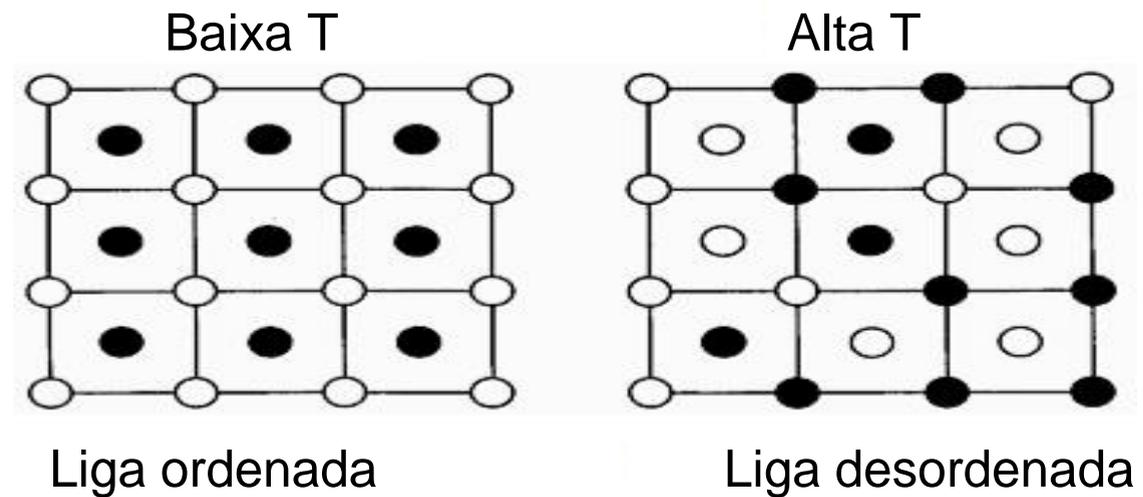
paramagnético

Magnetização



Temperatura

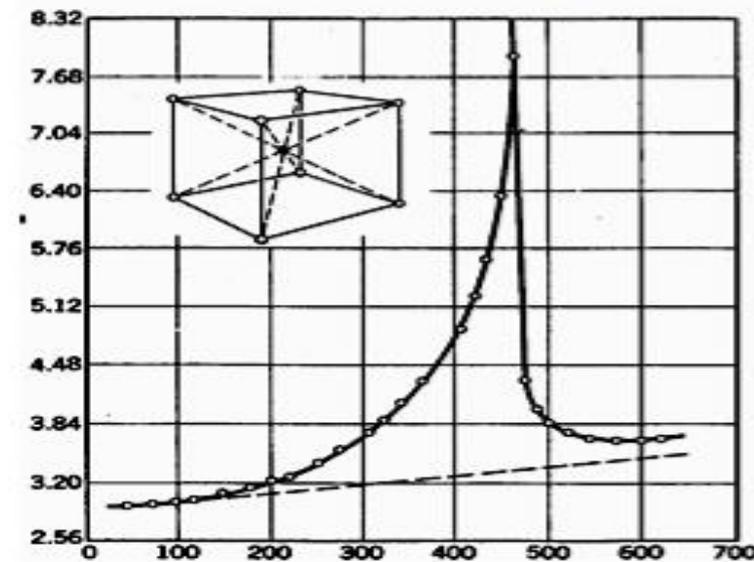
Ligas Binárias



Liga ordenada

Liga desordenada

Calor específico



Temperatura

Caso unidimensional

A função de partição, Z , é dada por:

$$Z = \sum_{\sigma_k = \pm 1} f_L(\sigma_1) \exp \left\{ K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + m \sum_{i=1}^{N+1} \sigma_i \right\} f_R(\sigma_{N+1})$$

where $K = \frac{J}{T}$ and $m = \frac{H}{T}$ where H is the magnetic field

Com nenhum campo magnético externo $m = 0$.

Com condições de contorno livres $f_L(\sigma) = f_R(\sigma) = 1$.

Fazendo a substituição

$$\sigma_i \sigma_{i+1} = s_i.$$

$$Z = \sum_{s_k = \pm 1} e^{K \sum_{i=1}^N s_i} = (2 \cosh K)^N$$

O modelo de Ising 1-D não têm uma transição de fase.

Caso 2-D

A energia é dada por

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j$$

Para uma rede de 2 x 2 há $2^4 = 16$ configurações

$E = -4J$	$E = 0J$			
$\begin{matrix} + & + & - & - \\ + & + & - & - \end{matrix}$	$\begin{matrix} + & & - & \\ - & - & & \end{matrix}$	$\begin{matrix} - & & + & \\ - & - & & \end{matrix}$	$\begin{matrix} - & - & & \\ - & & + & \\ - & - & & \end{matrix}$	$\begin{matrix} - & - & & \\ + & & - & \\ - & - & & \end{matrix}$
$E = +4J$	$\begin{matrix} - & & + & \\ + & + & & \end{matrix}$	$\begin{matrix} + & & - & \\ + & + & & \end{matrix}$	$\begin{matrix} + & + & & \\ + & & - & \\ + & + & & \end{matrix}$	$\begin{matrix} + & + & & \\ - & & + & \\ - & - & & \end{matrix}$
$\begin{matrix} + & & - & & - & & + \\ - & & + & & + & & - \end{matrix}$	$\begin{matrix} + & + & & \\ - & - & & \end{matrix}$	$\begin{matrix} - & & + & \\ - & - & & \end{matrix}$	$\begin{matrix} - & - & & \\ + & + & & \end{matrix}$	$\begin{matrix} + & & - & \\ + & - & & \end{matrix}$

Energia, E, é proporcional ao comprimento dos limites, e maior o limite, maior (mais positivo) a energia.

Em um caso-1D, $E \sim \#$ de paredes

No caso de 3-D, $E \sim$ área de fronteira

O limite superior para a entropia, S, é $k \ln 3$ por unidade de comprimento.

O sistema quer minimizar $F = E - TS$.

Em baixas T, a configuração de menor energia dominam.

Em altas T, as configurações com entropia mais elevada domina.

Diagramas de fase

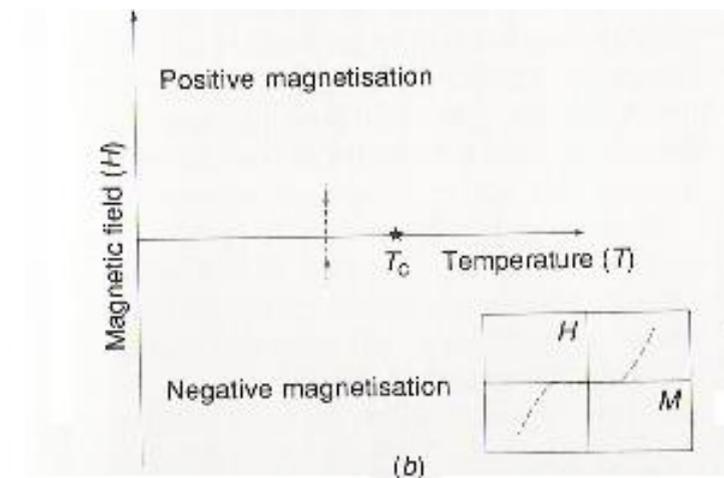
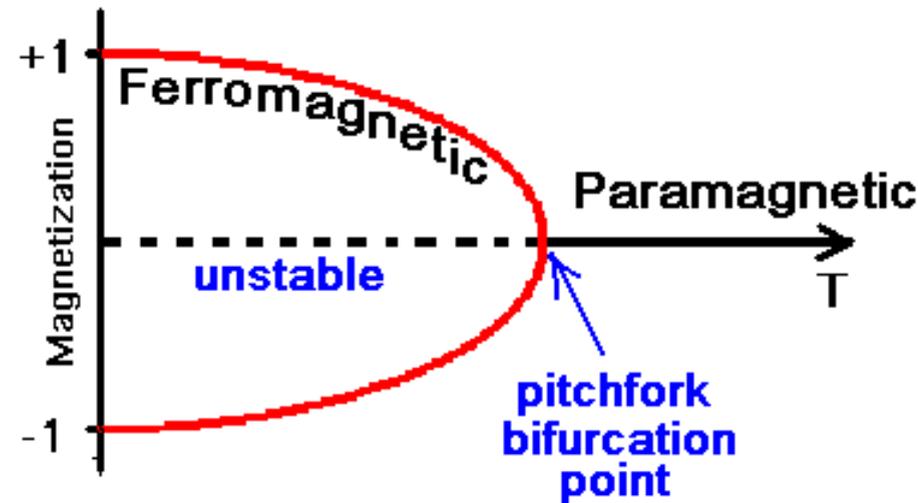
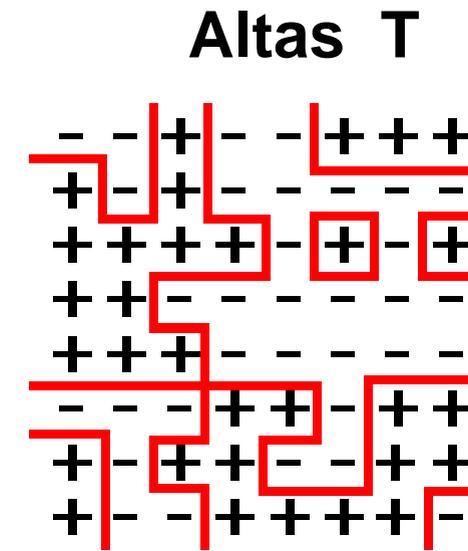
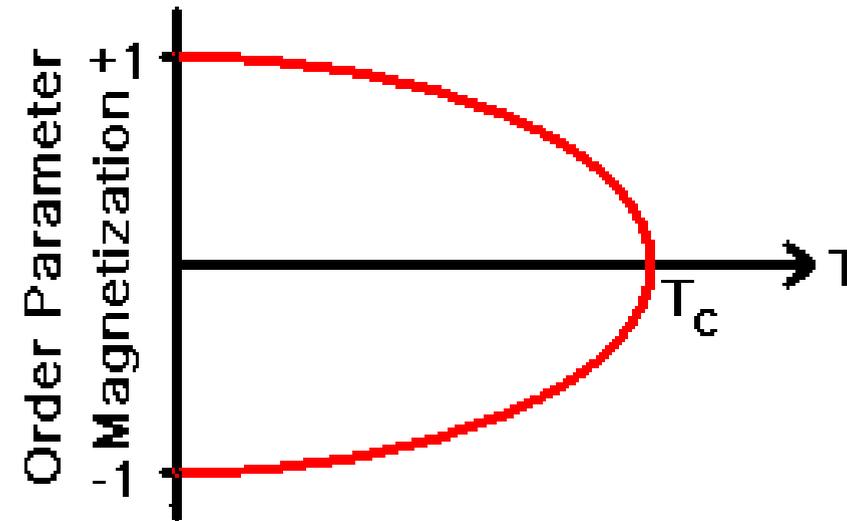
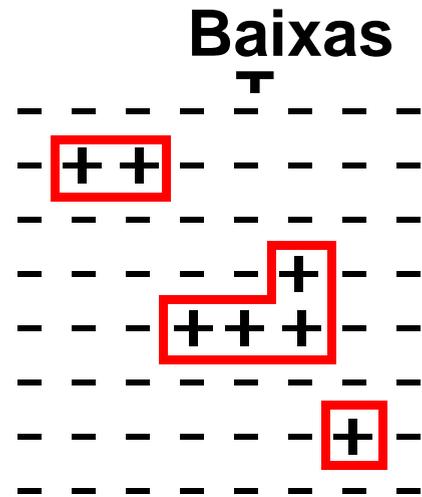
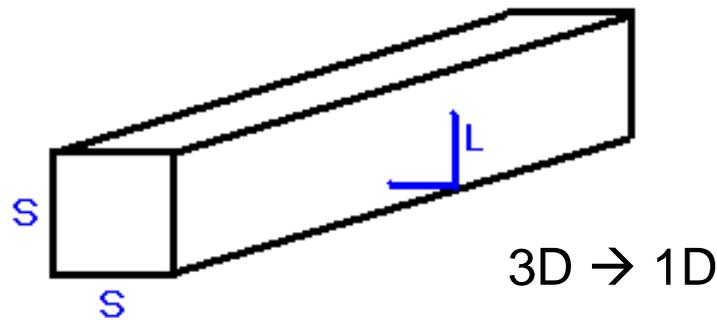


Figure 8.1. (b) The critical point of a magnet. Below a critical temperature T_c a magnet possesses a magnetic moment. The direction of the magnetic moment can be switched by a magnetic field, H . Along the line of zero magnetic field different phases, distinguished by the direction of the magnetic moment, coexist. As the magnetic field is varied at constant temperature (the grey path) the orientation of the magnetisation, M , is reversed at the line of phase coexistence (inset). The line of coexistence ends at T_c where the magnetic moment vanishes, and the different phases merge into a single paramagnetic phase.

O que ocorre em T_c ?

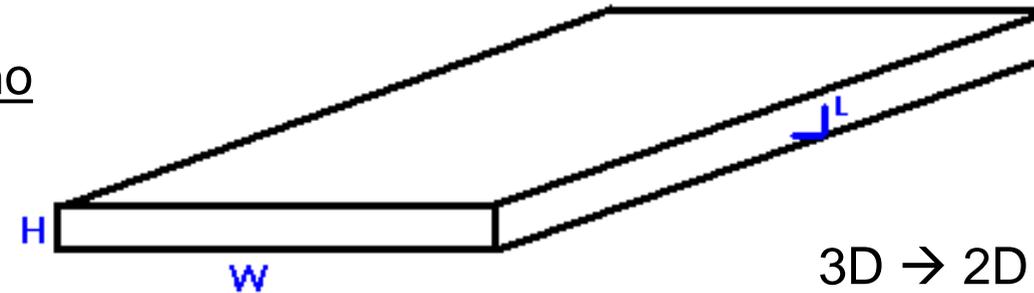
Comprimento de correlação - distância sobre a qual os efeitos de uma perturbação espalhar.

Cadeias longas



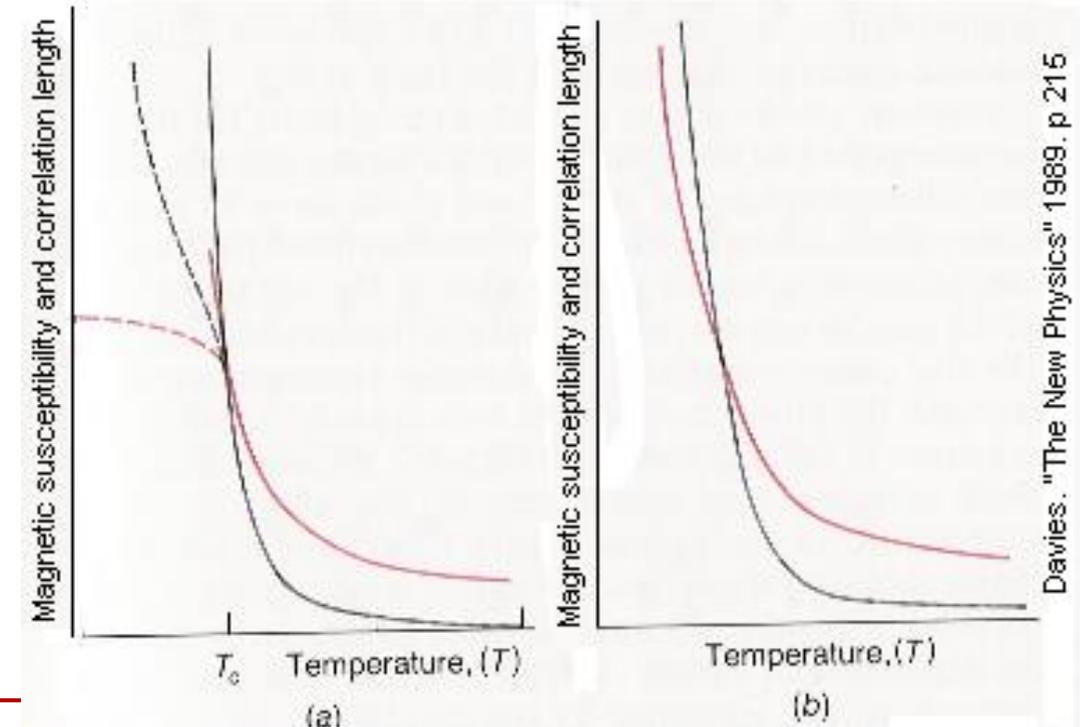
Aproximando-se do lado de alta T_c

Filme fino



Comprimento de correlação aumenta sem limite (diverge) em T_c , torna-se comparável ao comprimento de onda da luz (opalescência crítica).

Susceptibilidade magnética - relação entre o momento magnético induzido ao campo magnético aplicado, também diverge em T_c .



Magnetic susceptibility (black) and correlation lengths (red) for (a) a finite cube (dashed lines) compared with the infinite three-dimensional system (solid lines), and (b) a bar of square cross-section.

Calor específico, C , diverge em T_c .

Magnetização, M , é contínua.

Entropia, S , é contínua.

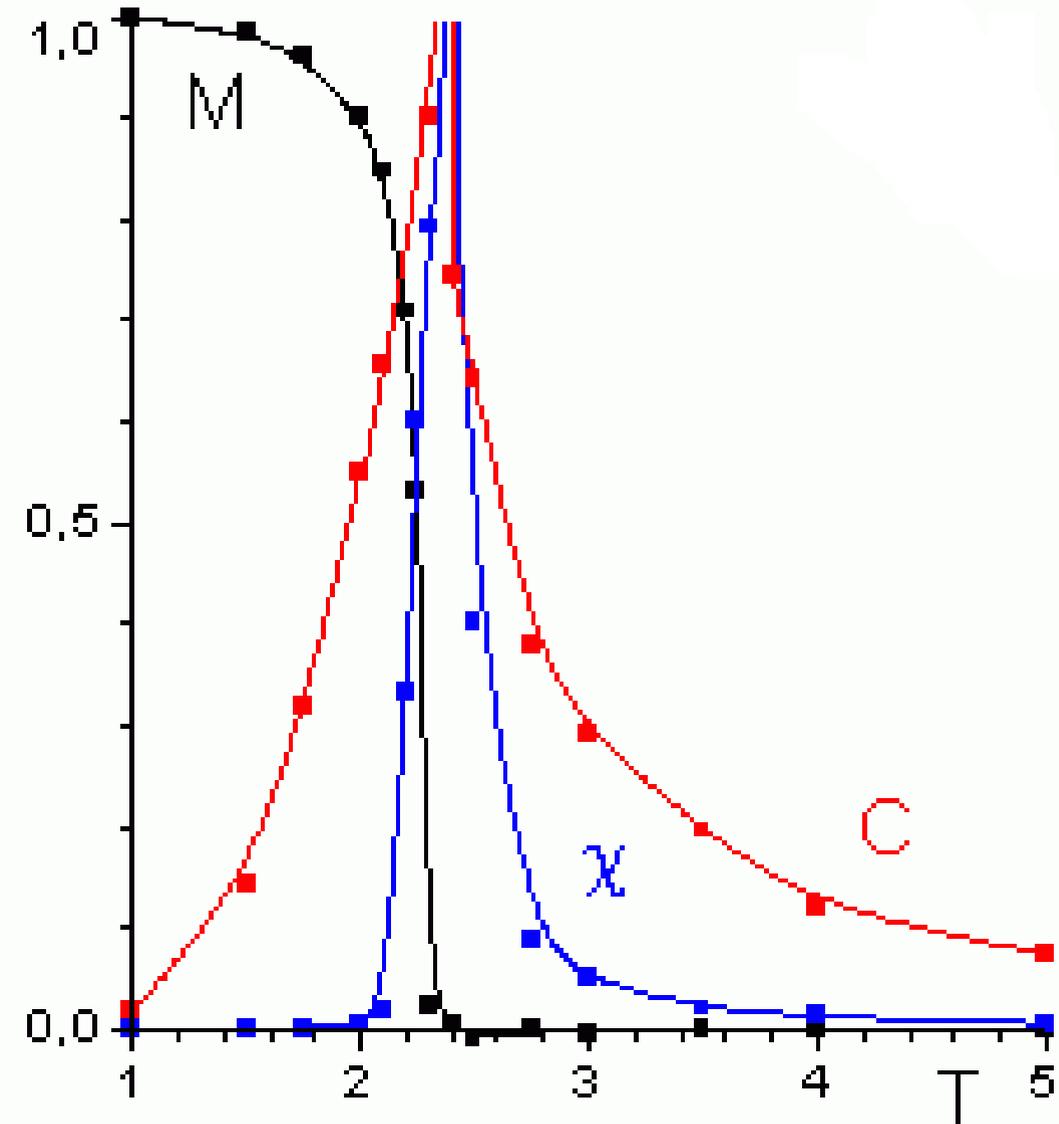
Transição de Fase de 2ª ordem

Magnetização, M , (parâmetro de ordem) - 1ª derivada da energia livre - contínuo

Entropia, S - 1ª derivada da energia livre - contínuo

Calor específico, C - 2ª derivada da energia livre - descontínua

Susceptibilidade magnética, X - segunda derivada da energia livre - descontínua



<http://www.ibiblio.org/e-notes/Perc/sing.htm>

Parâmetro de ordem, M (magnetização), calor específico, C e susceptibilidade magnética, X , próximo do ponto crítico para o Modelo de Ising 2D onde $T_c = 2,269$.

Ising 2-D – Qual o valor de T_c (Premio Nobel 1968 – Lars Onsager)

De Onsager

$$2 \tanh^2(2\beta J) = 1$$

$$\tanh x = \frac{e^{2x} - 1}{e^{2x} + 1}$$

let $2\beta J = x$ then $2 \tanh^2 x = 1$

$$2 \left(\frac{e^{2x} - 1}{e^{2x} + 1} \right)^2 = 2 \frac{e^{4x} - 2e^{2x} + 1}{e^{4x} + 2e^{2x} + 1} = 1$$

$$2e^{4x} - 4e^{2x} + 2 = e^{4x} + 2e^{2x} + 1$$

$$e^{4x} - 6e^{2x} + 1 = 0$$

let $e^{2x} = y$ then $y^2 - 6y + 1 = 0$

quad formula yields $y = 3 \pm 2\sqrt{2}$ so

$$e^{2x} = 3 \pm 2\sqrt{2}$$

$$x = \frac{1}{2} \ln(3 \pm 2\sqrt{2}) \text{ so}$$

$$2\beta J = \frac{1}{2} \ln(3 \pm 2\sqrt{2})$$

$$2\beta J = \frac{1}{2} \ln(3 \pm 2\sqrt{2})$$

$$\frac{2J}{k_B T} = \frac{1}{2} \ln(3 \pm 2\sqrt{2})$$

$$k_B T = \frac{4J}{\ln(3 \pm 2\sqrt{2})} \text{ but } 3 - 2\sqrt{2} < 1$$

o que levaria a T negativas, fisicamente a única resposta correta seriam Valores positivos

$$k_B T_C = \frac{4J}{\ln(3 + 2\sqrt{2})} = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269J$$

$$k_B T_C = 2.269J$$

Expoentes críticos

Temperatura reduzida, t

$$t \equiv \frac{T - T_C}{T_C}$$

Calor específico $C \propto |t|^{-\alpha}$

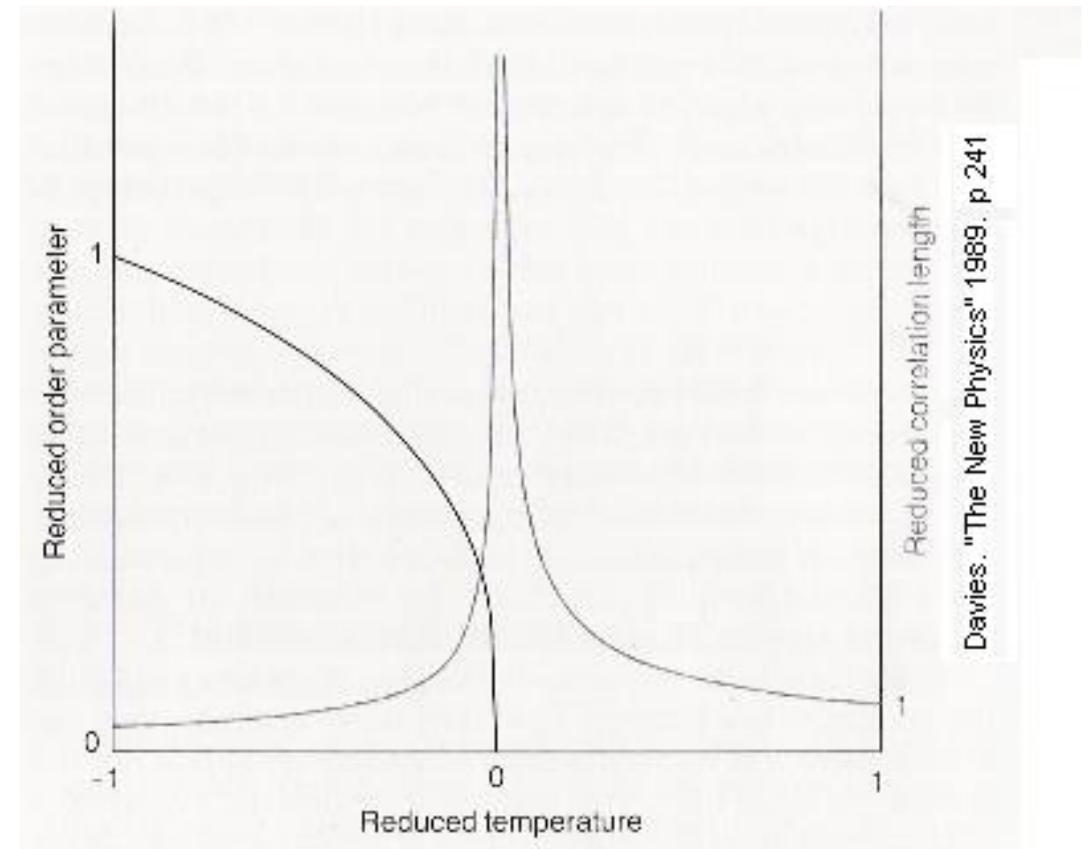
Magnetização $M \propto |t|^\beta$

Susceptibilidade magnética $\chi \propto |t|^{-\gamma}$

comprimento de correlação $\xi \propto |t|^{-\nu}$

$\alpha = 0$ (log divergence)

$$\beta = \frac{1}{8} \quad \gamma = \frac{7}{4} \quad \nu = 1$$



Critical behavior of the order parameter and the correlation length. The order parameter vanishes with the power β of the reduced temperature t as the critical point is approached along the line of phase coexistence. The correlation length diverges with the power ν of the reduced temperature.

Os expoentes exibem universalidade ponto crítico (independem de detalhes do modelo).
Isto explica o sucesso do modelo de Ising em fornecer uma descrição quantitativa de ímãs reais.

Amostragem por importância

Generalização multidimensional de

$$I = \int_a^b g(x) p(x) dx$$

Sistema Discreto: *Modelo de Ising*

Função de Distribuição da Probabilidade

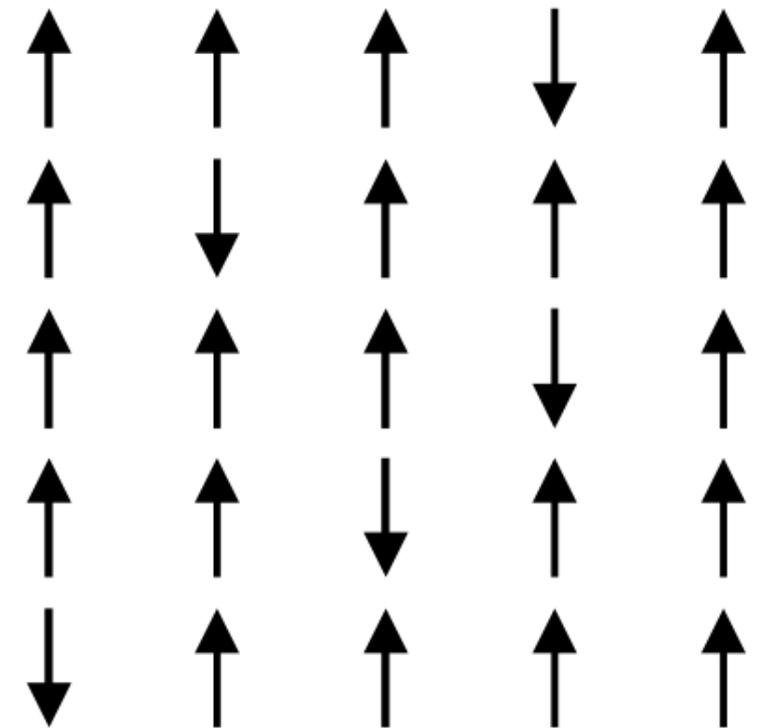
$$P_i = \frac{1}{Z} \exp [-\beta E_i]$$

Função de Partição

$$Z = \sum_i \exp [-\beta E_i]$$

Valor médio: energia

$$\langle E \rangle = \sum_i E_i P_i$$



Modelo de Ising usando Metropolis

1. Define a temperatura T e o campo externo h
 2. Inicializa o sistema (configuração aleatória ou de simulação anterior)
 3. Realiza N número de ciclos Monte Carlo através da rede
 4. Excluir as 1as configurações (equilíbrio)
 5. Calcula as médias e errors das configurações estatisticamente independentes (Produção)
-

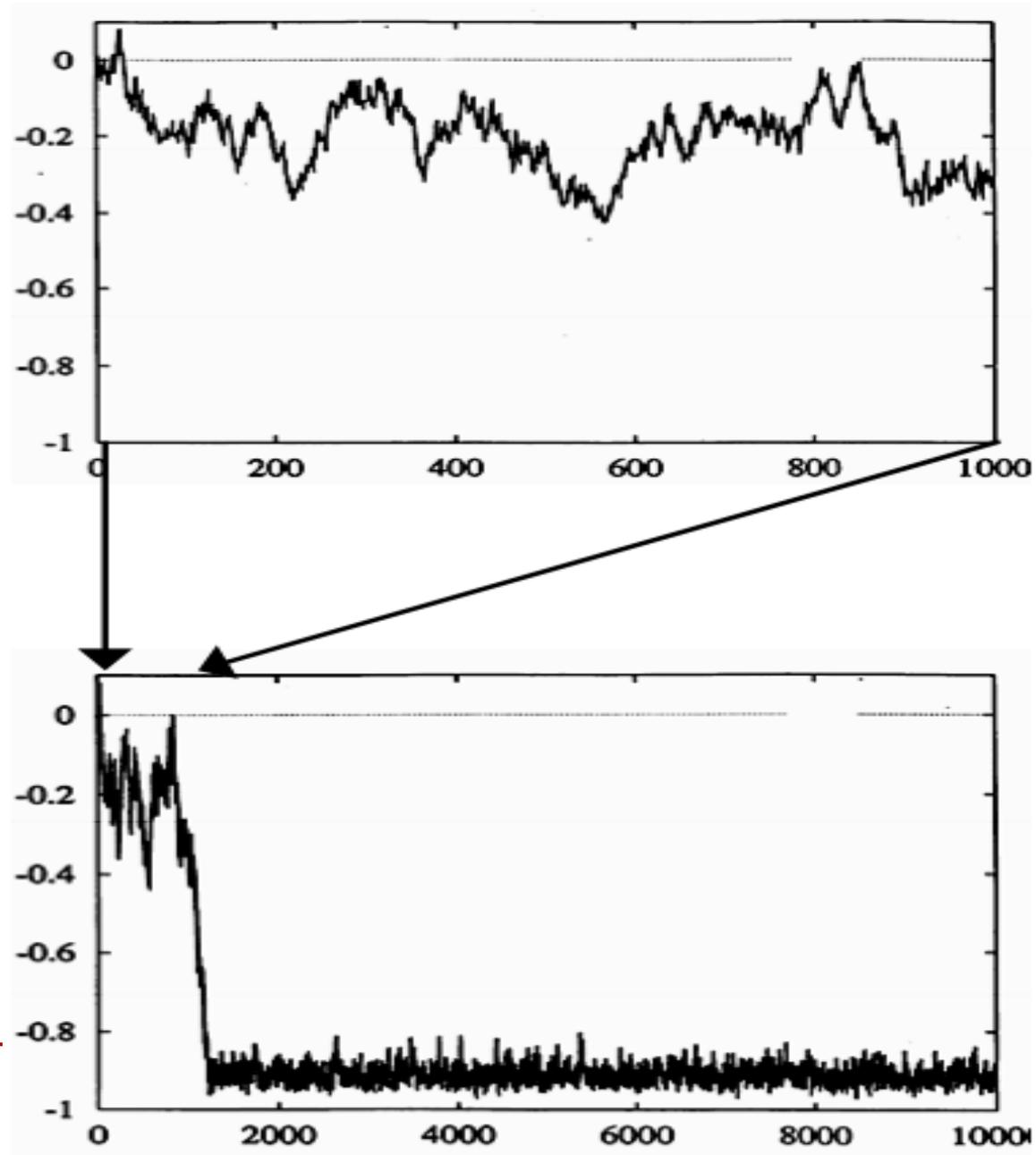
Modelo de Ising usando Metropolis

Seção do Metropolis:

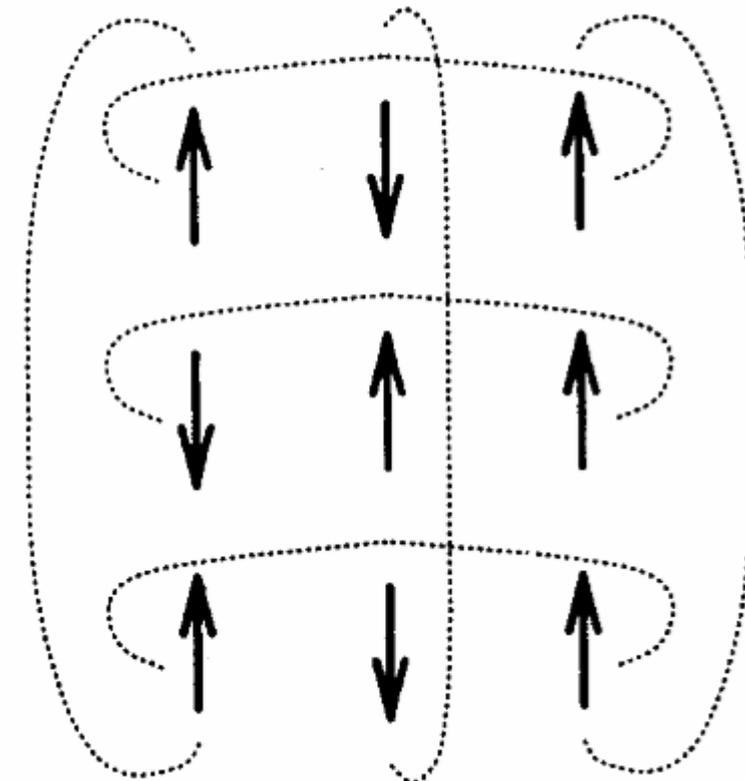
- 3a. Realiza uma tentativa de mudança, invertendo um spin escolhido aleatoriamente $\uparrow \rightarrow$
 \downarrow
- 3b. Determina a diferença de energia ΔE
- 3c. Se $\Delta E \leq 0$ aceita a nova configuração
- 3d. Se $\Delta E > 0$, gera um número aleatório r entre 0 e 1 e compara com a probabilidade:
 $\text{Exp}(-\Delta E/k_B T) \geq r$ (aceita),
se não rejeita e mantém a configuração
-

Modelo de Ising

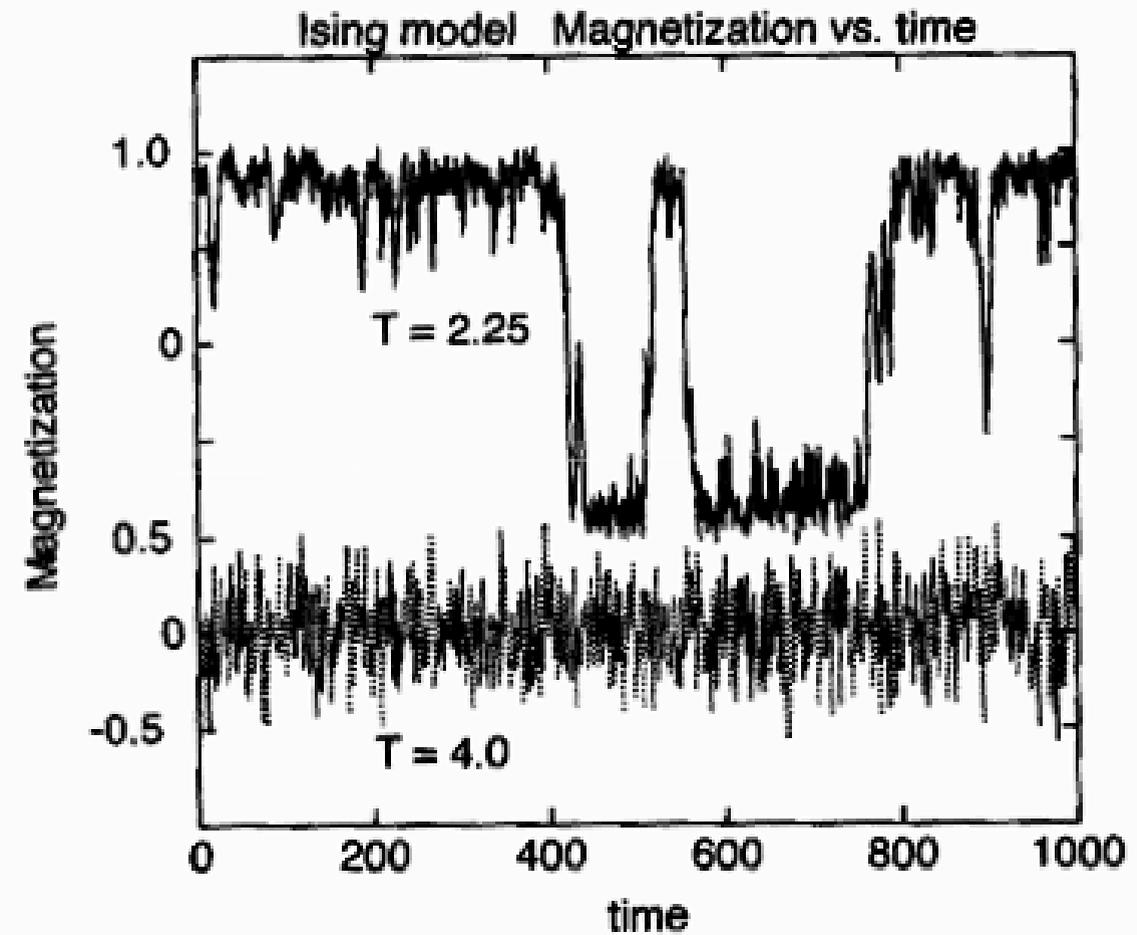
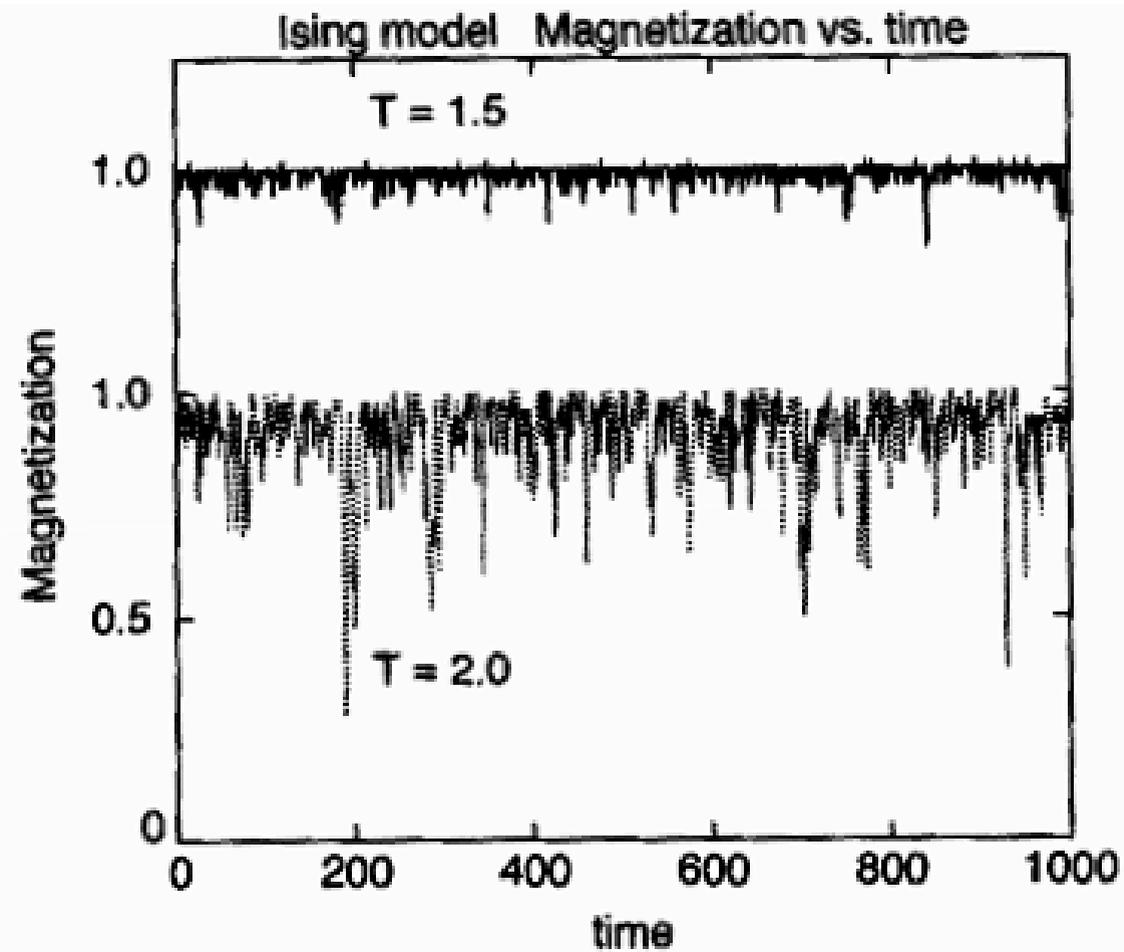
Equilibração: Verificar se o sistema atingiu a condição de equilíbrio



Condições Periódicas de Contorno

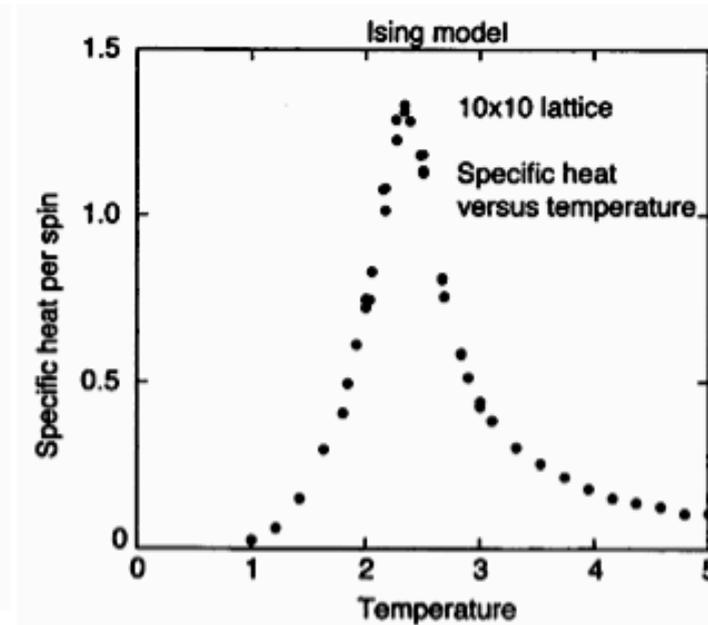
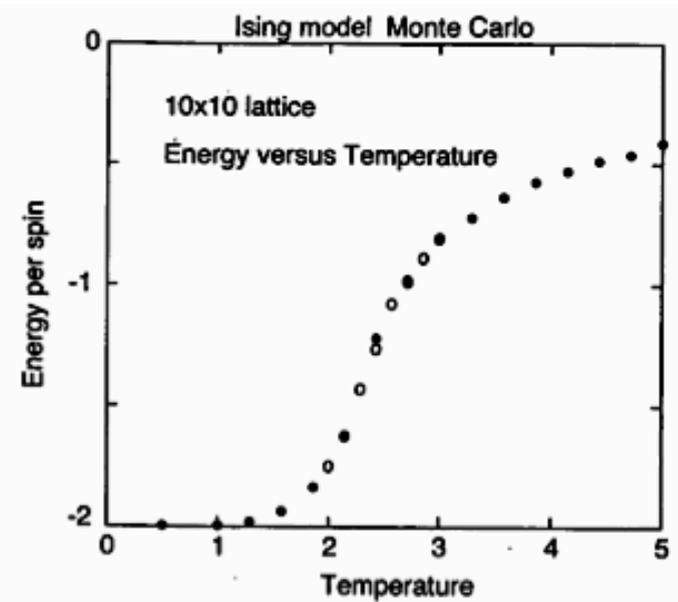
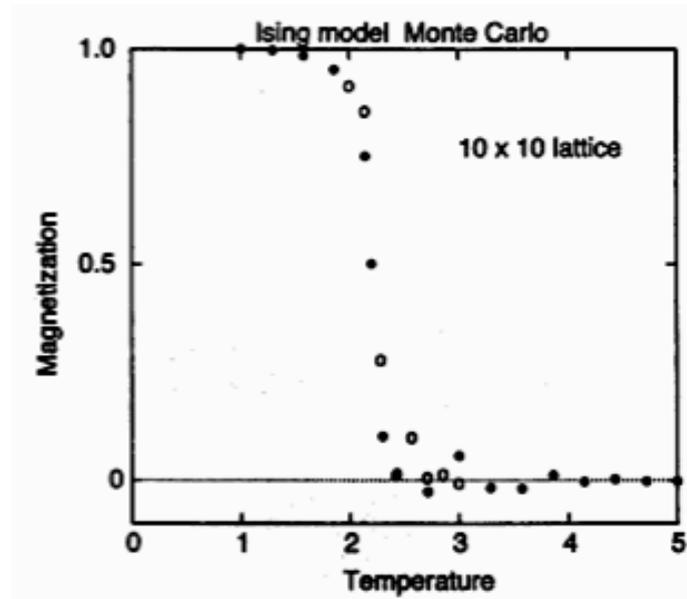
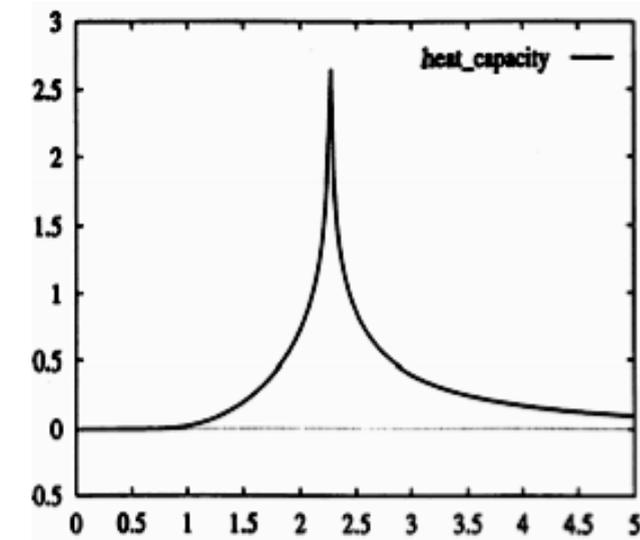
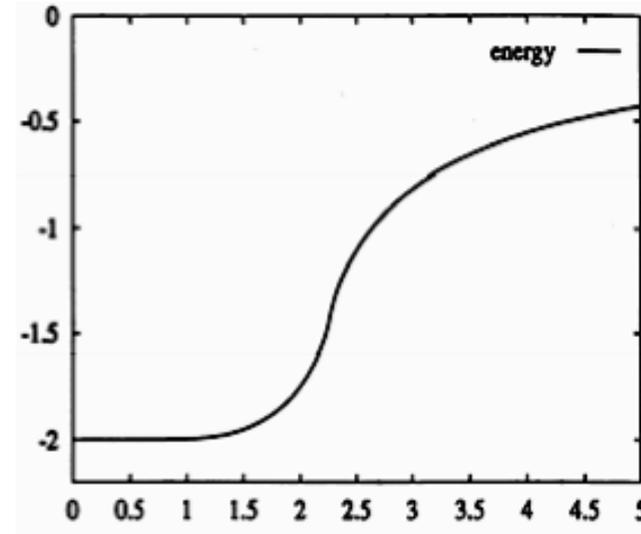
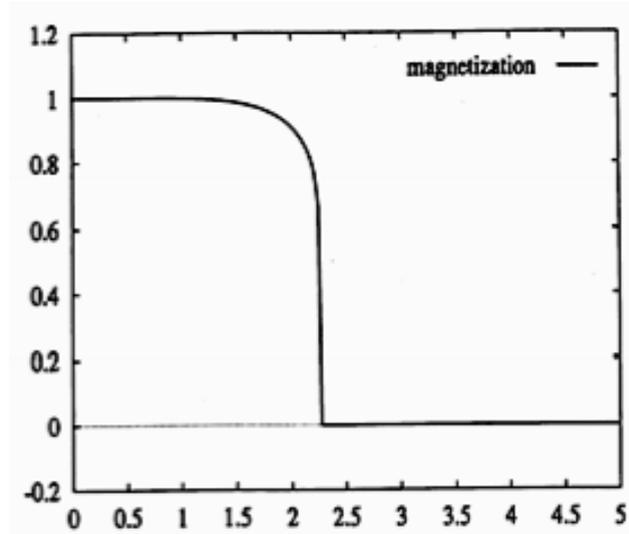


Modelo de Ising: simulações



Temperatura em unidades de J/k_B

Exato vs simulação

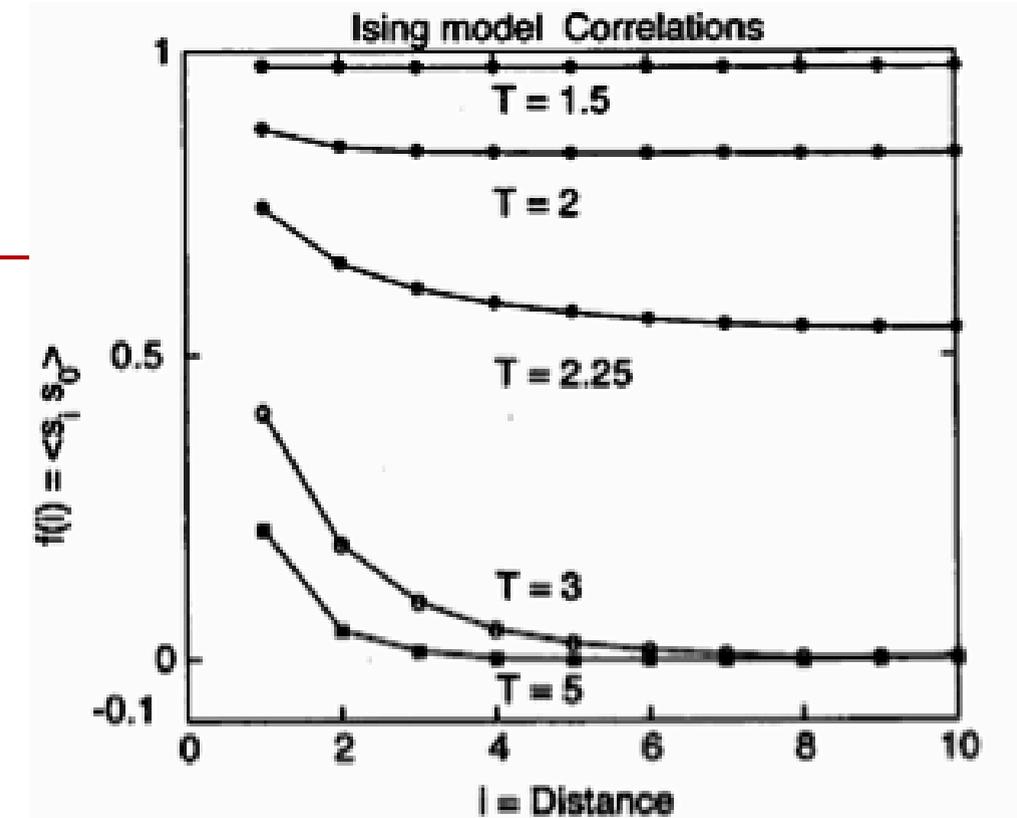


Correlações de spin

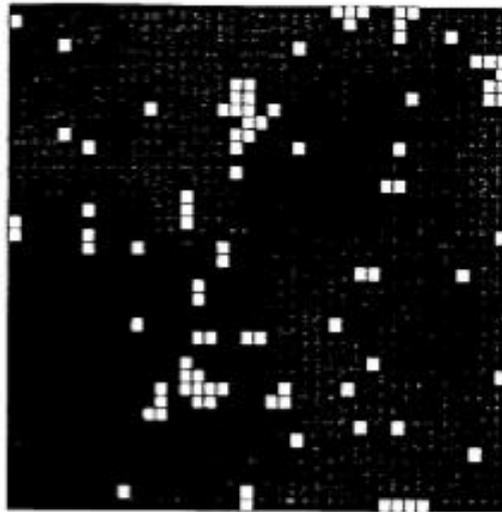
Função de correlação espacial

$f(i) = \langle s_i s_0 \rangle$, onde s_i é o spin localizado no site da rede i , distante de s_0 .

A temperatura T tem unidades de J/k_B



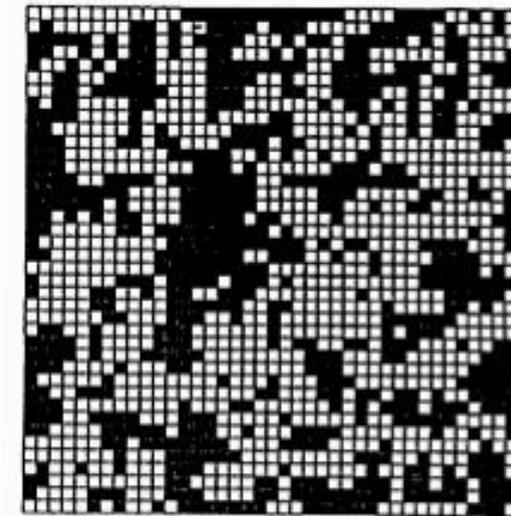
T = 2.0



T = 2.4



T = 3.0



Experimentação com o modelo de Ising

Acesse o simulador pelo moodle:

<https://mattbierbaum.github.io/ising.js/>

Para campo (field) zero, varie sistematicamente a temperatura (0 a 5) e guarde as informacoes da energia media $\langle e \rangle$ e erro, magnetização $\langle m \rangle$ e erro e grafique a energia e magnetização em função da temperatura.

Na temperatura crítica (2.27), abaixo (1.00) e acima (5.00) dela, altere o campo magnético (-1, +1) e comente sobre o comportamento dos spins no Sistema e os valores de $\langle e \rangle$ e $\langle m \rangle$.
