F-888A – Prova 3 – 28/11/2018

ATENÇÃO: TODAS AS RESPOSTAS DEVEM SER JUSTIFICADAS.

**1)** (a) Utilizando o princípio da Correspondência para derivar equações de movimento para valores médios de observáveis quânticos e a relação $\boldsymbol{v_g} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\boldsymbol{k}} E(\boldsymbol{k})$ para a velocidade de grupo, mostre que a dinâmica dos elétrons em bandas pode ser descrita em termos de uma relação análoga à 2a. Lei de Newton, introduzindo o conceito de uma massa efetiva $(m^*)_{ij}$. Encontre uma relação para $(1/m^*)_{ij}$ em termos da relação de dispersão de uma dada banda E(**k**). (1.5)
(b) Considere uma banda com dispersão obtida pelo modelo de tight-binding para uma estrutura cúbica simples com parâmetro de rede *a*, $E(\boldsymbol{k}) = E_i - A - 2B(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$ , onde *A* e *B* parâmetros obtidos a partir de integrais calculadas a partir dos orbitais atômicos. Calcule todos os componentes do tensor massa efetiva para elétrons nessa banda que tenham $k \approx 0$ . (1.5)

**2)** (a) Utilizando a Equação de Boltzmann $\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\nabla_{\boldsymbol{r}} f - \frac{e}{\hbar}\epsilon\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{esp}$ e o *ansatz* do tempo de relaxação para um material sujeito a um campo elétrico **ε** e com uma mesma temperatura *T* por toda a sua extensão (ou seja, homogêneo em **r**) e desprezando termos de ordem 2 ou superior em **ε**, encontre ***f(k)*** e mostre que o resultado é equivalente a deslocarmos a superfície de Fermi no espaço **k** na mesma direção (mas em sentido oposto) do campo **ε**. Ilustre esquematicamente o resultado no espaço **k**, e explique, utilizando este mesmo espaço, o aparecimento de uma corrente elétrica associada à aplicação de **ε**. (2.0)
(b) Encontre ***f(k)*** para um material homogêneo em **r**, considerando agora também termos de ordem 2 em **ε**, i.e., desprezando apenas termos de ordem 3 ou superior. (1.0)

3) (a) Grafique esquematicamente a densidade de estados com *spins up* e *down* para uma banda de condução típica de um metal em três dimensões $(D(E) \propto E^{1/2})$ sem magnetismo espontâneo, (i) na ausência de um campo magnético externo ($B_{0z}$=0) e (ii) na presença de um campo magnético $(B_{0z} \neq 0)$ . Calcule e indique na figura o valor quantitativo dos desvios das curvas da densidade de estados para o caso $(B_{0z} \neq 0)$ em relação ao caso ($B_{0z}$=0), em função de $B_{0z}$, do fator giromagnético do elétron *g* e do magneton de Bohr $\mu_B$ . PS: $U = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$ e $\boldsymbol{\mu} = g\mu_B(\boldsymbol{S}/\hbar)$ $(g \sim -2)$ (1.0)
(b) Encontre a susceptibilidade paramagnética $\chi_{para}$ para um gás de elétrons de condução em uma banda não totalmente preenchida, em função da densidade de elétrons no nível de Fermi $D(E_F)$, $\mu_B$ , g, e da permeabilidade do vácuo $\mu_0$ ignorando efeitos devido ao movimento orbital dos elétrons (paramagnetismo de Pauli). PS: $\mu_0 M_{0z} = \chi_{para} B_{0z}$ . (1.5)

4) (a) Descreva qualitativamente o efeito Meissner em supercondutores e explique a sua diferença em relação ao fenômeno esperado para um condutor perfeito (ρ=0). Como distinguir experimentalmente as duas situações ? (1.0)
(b) Proponha uma explicação qualitativa para o fato dos metais ferromagnéticos puros (Fe, Co, Ni) não se tornarem supercondutores a baixas temperaturas. (0.5)

GABARITO

**1) a)** Pelo princípio da Correspondência: $\boldsymbol{F}=\frac{d\,\boldsymbol{p}}{d\,t} \rightarrow -e\boldsymbol{\epsilon}=\hbar\frac{d\,\boldsymbol{k}}{d\,t}$ , onde $\boldsymbol{p}$ e $\boldsymbol{k}$ se referem aos valores médios dos observáveis quânticos correspondentes. A partir da relação $\boldsymbol{v_g}=\frac{1}{\hbar}\nabla_{\boldsymbol{k}}E(\boldsymbol{k})$ dada no enunciado, temos:

$$\frac{d\,v_{gi}}{d\,t}=\frac{1}{\hbar}\frac{d}{d\,t}(\nabla_{\boldsymbol{k}}E_{\boldsymbol{k}})_i=\frac{1}{\hbar}(\nabla_{\boldsymbol{k}}\frac{d\,E_{\boldsymbol{k}}}{d\,t})_i=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial k_i}\sum_j(\frac{\partial E}{\partial k_j})\frac{d\,k_j}{d\,t}=\frac{1}{\hbar}\sum_j\frac{\partial^2 E}{\partial k_i\partial k_j}(\frac{-e\epsilon_j}{\hbar})=\frac{1}{\hbar^2}\sum_j\frac{\partial^2 E}{\partial k_i\partial k_j}(-e\epsilon_j)$$

Esta equação é análoga à 2a. Lei de Newton $\boldsymbol{a}=\frac{1}{m}\boldsymbol{F}$ se definirmos um vetor massa efetiva como:

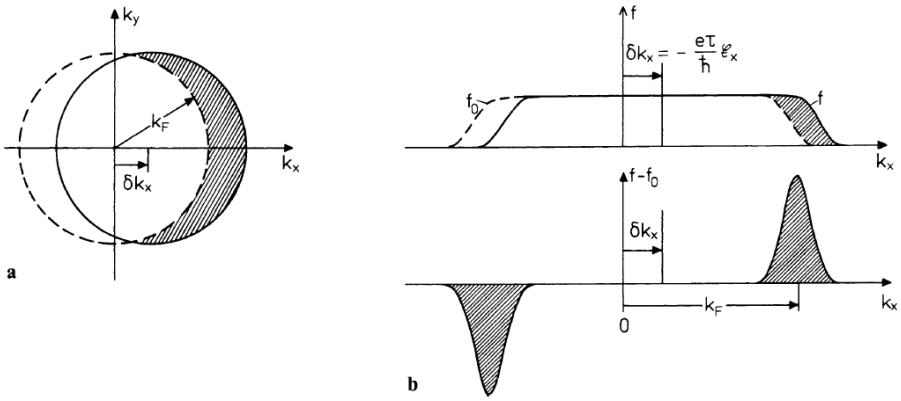
$$(\frac{1}{m^*})_{ij}=\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k_i\partial k_j} \quad .$$

**(b)** Como $E(\boldsymbol{k})=E_i-A-2B(\cos k_x a+\cos k_y a+\cos k_z a)$ , vemos que os termos cruzados $\frac{\partial^2 E}{\partial k_i\partial k_j}=0$ para $i\neq j$ . Além disso $\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2}=2Ba^2\cos k_x a\sim 2Ba^2\approx\frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2}\approx\frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2}$ para k~0.

Assim, o tensor (1/m*) fica: $(\frac{1}{m^*})=\begin{pmatrix}2Ba^2/\hbar^2 & 0 & 0\\ 0 & 2Ba^2/\hbar^2 & 0\\ 0 & 0 & 2Ba^2/\hbar^2\end{pmatrix}$

**2) a)** Para um sistema espacialmente homogêneo, temos: $\nabla_{\boldsymbol{r}}f=0$ . Além disso, em condição estácionária, vale que $\frac{\partial f}{\partial t}=0$ . Portanto, a partir da equação de Boltzmann, ficamos com a equação simplificada $\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}f+(\frac{\partial f}{\partial t})_{esp}=0$ . O *ansatz* do tempo de relaxação diz que o termo de espalhamento é proporcional à diferença entre *f* e seu valor de equilíbrio: $(\frac{\partial f}{\partial t})_{esp}=-\frac{f-f_0}{\tau}$ .

Assim, ficamos com: $f(\boldsymbol{k})=f_0(\boldsymbol{k})+\tau\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}f(\boldsymbol{k})$ . Em primeira ordem, podemos substituir o termo *f(**k**)* no lado direito desta equação por $f_0$, ficando com $f(\boldsymbol{k})=f_0(\boldsymbol{k})+\tau\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}f_0(\boldsymbol{k})$ . Esta relação é equivalente a uma expansão em Taylor em primeira ordem para *f*, i.e., $f(\boldsymbol{k})=f_0(\boldsymbol{k}+\tau\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon})$ . O resultado pode ser ilustrado na figura abaixo:

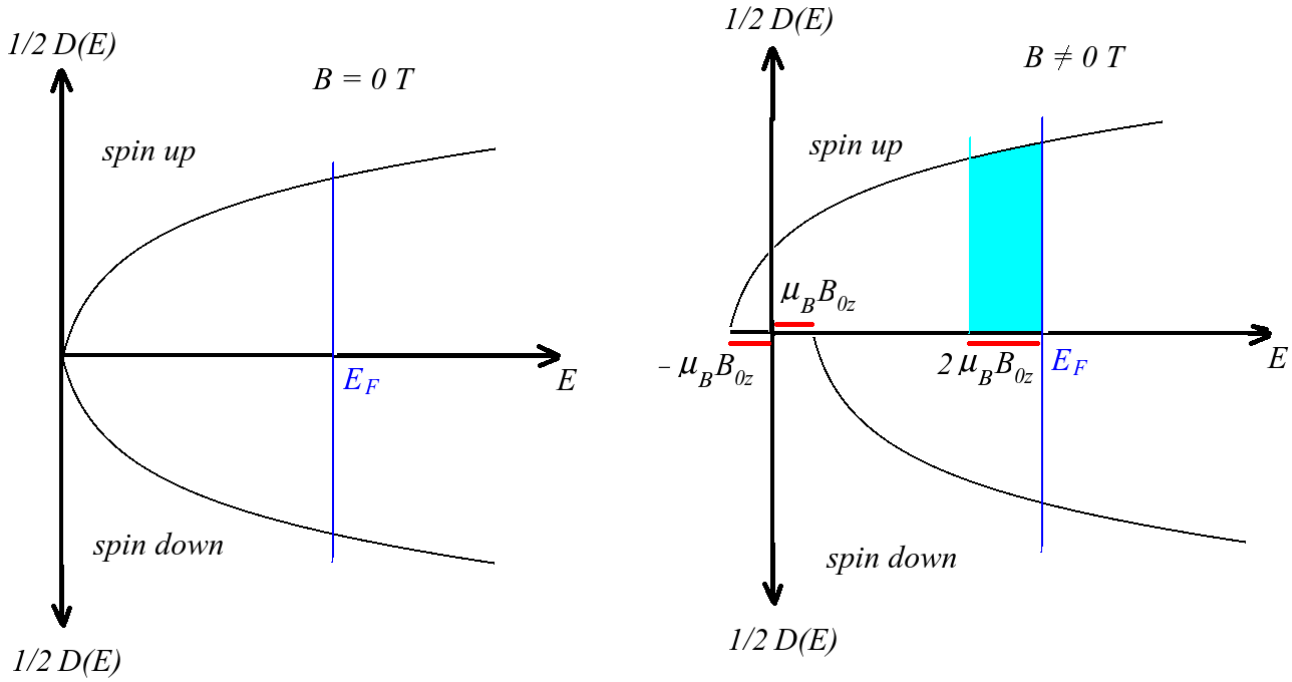


ou seja, a superfície de Fermi do material é deslocada rigidamente na direção do campo (mas em sentido oposto), causando um desbalanço entre as populações de elétrons ocupando níveis com momentos opostos. Este desbalanço leva ao aparecimento de uma corrente elétrica como resposta à aplicação do campo elétrico, levando à condutividade em metais.

**b)** Neste caso, partimos da relação $f(\boldsymbol{k})=f_0(\boldsymbol{k})+\tau\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}f(\boldsymbol{k})$ e substituímos o termo $f(\mathbf{k})$ à direita:

$$f(\boldsymbol{k})=f_0(\boldsymbol{k})+\tau\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}[f_0(\boldsymbol{k})+\tau\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}f(\boldsymbol{k})]=f_0(\boldsymbol{k})+\tau\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}f_0(\boldsymbol{k})+\tau\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}[\tau\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}f_0(\boldsymbol{k})]+O(\epsilon^3)$$

**3) a)** A campo magnético nulo, a densidade de estados com spins up e down são idênticas, seguindo uma dependência aproximada com a energia $D(E)\propto E^{1/2}$, conforme mencionado no enunciado. Na presença de campo, os elétrons com momento magnético de spin alinhados com o campo (spin up) irão sofrer uma redução de energia dada pela interação dipolar com o campo, i.e., $\Delta E=-\mu_z B_{0z}=-g\mu_B(S_z/\hbar)B_{0z}\approx-\mu_B B_{0z}$ $(g\approx-2, S_z=-1/2)$. O resultado pode ser resumido na figura abaixo:

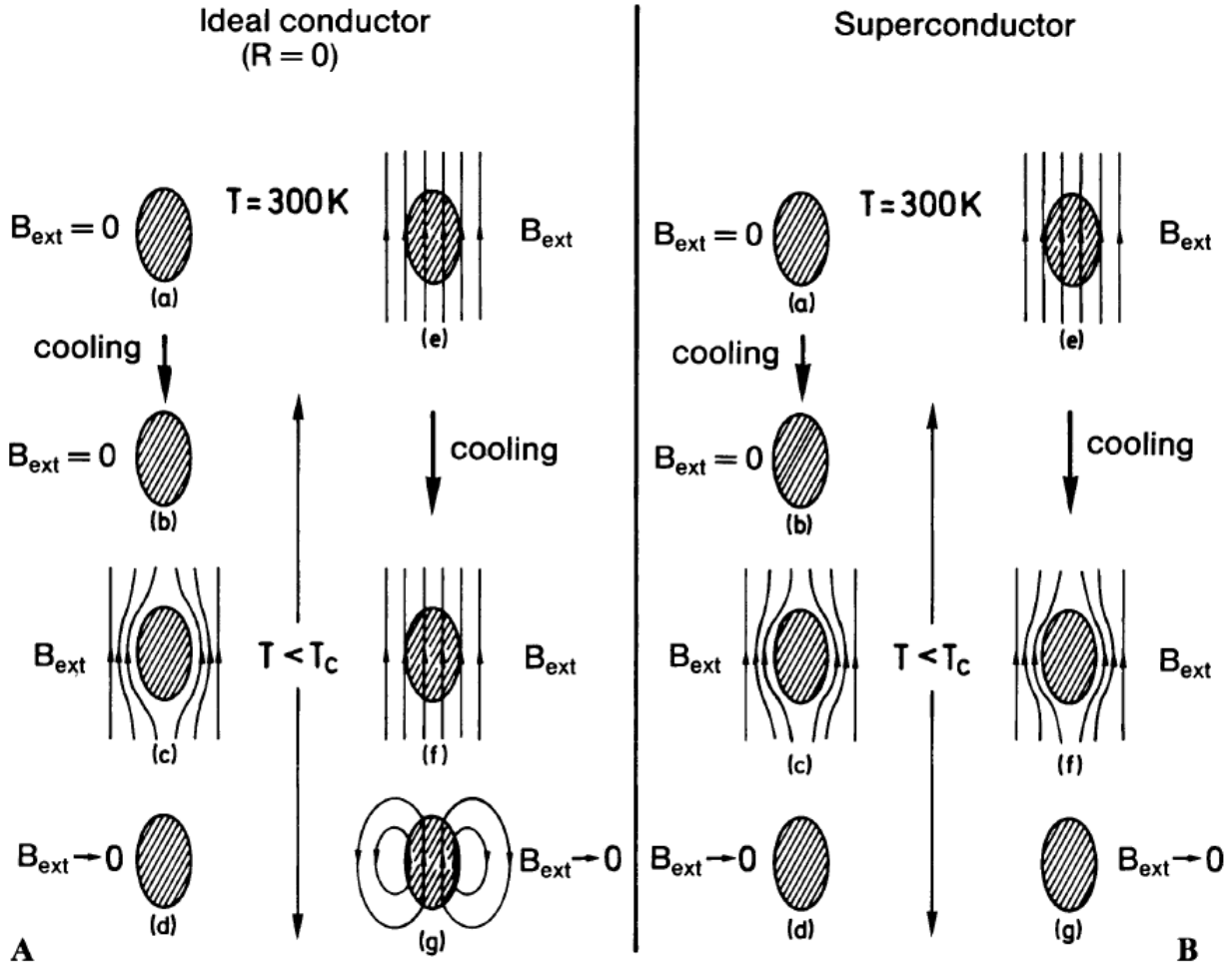



**b)** A magnetização induzida pela presença de um campo magnético $B_{0z}$ será dada por (vide a figura acima): $M_{0z}=(n_{up}-n_{down})m_z=[2\mu_B B_{0z}\times\frac{1}{2}D(E_F)]\mu_B=\mu_B^2 D(E_F)B_{0z}$.

Usando a relação $\mu_0 M_{0z}=\chi_{para}B_{0z}$, a susceptibilidade magnética será $\chi_{para}=\mu_B^2 D(E_F)/\mu_0$.

**4) a)** Para um condutor perfeito, a resistividade é nula. Podemos, a partir da Lei de Faraday, $\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}$, tomar um caminho fechado imaginário dentro do sólido e realizar uma integral de área em ambos os lados da equação e usar a lei de Stokes, ficando com $RI=\oint\boldsymbol{E}\cdot d\boldsymbol{l}=\dot{\Phi}=0$ onde $\Phi$ é o fluxo de campo magnético. Ou seja, não há variação temporal do fluxo magnético em um condutor perfeito. Assim, se já houver um fluxo magnético pré-existente quando o material se tornar

um condutor perfeito, este fluxo continuará presente em tempos posteriores. Em supercondutores, ocorre diferente, pois o campo magnético é sempre expelido do material independentemente das condições existentes antes dele se tornar supercondutor (efeito Meissner). A diferença entre os dois casos pode ser ilustrada na figura abaixo:




**b)** Conforme inferido pela existência do efeito Meissner, o estado supercondutor parece ser incompatível com a presença de campos magnéticos no interior do material. Enquanto que um campo magnético externo é sempre blindado pela ação de correntes de superfície, estas correntes não são capazes de blindar campos magnéticos originários do interior do próprio material, sugerindo que o estado supercondutor é incompatível com um estado em que haja magnetização espontânea, como é o caso dos metais ferromagnéticos.