

Modelos para Elétrons em Cristais

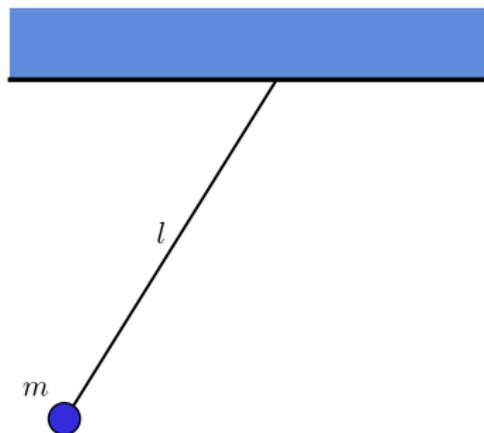
Antonio T. Costa

Panoramas da Física - 1/2011

Plano

- Modelos de sistemas físicos
- Primeiro modelo: sólidos cristalinos
- Elétrons em sólidos cristalinos
- Magnetismo - spin eletrônico e interação eletrostática
- Isolantes \times Metais
- Ondas de spin

Modelos de Sistemas Físicos



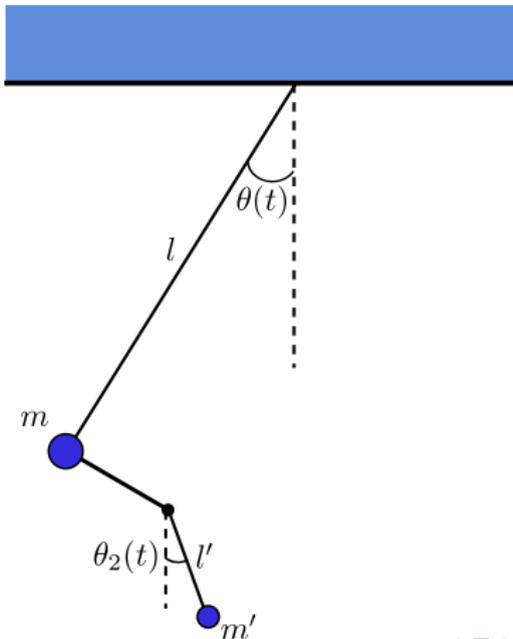
Aplicando-se a segunda lei de Newton,

$$\frac{d^2\theta(t)}{dt^2} = \frac{g}{l} \sin[\theta(t)].$$

Se apenas o movimento do centro de massa nos interessa o modelo super-simplificado “funciona”.

Modelos de Sistemas Físicos

Um modelo um pouco mais sofisticado, mas bem mais complicado:



Modelos de Sistemas Físicos - Gás Ideal

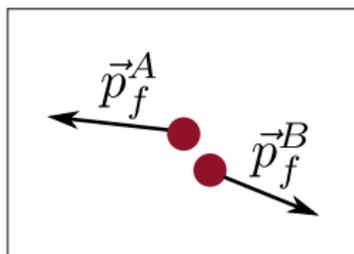
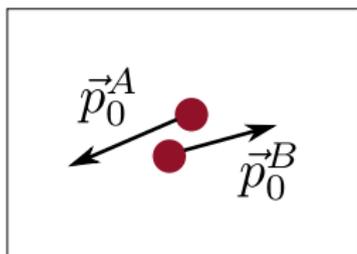
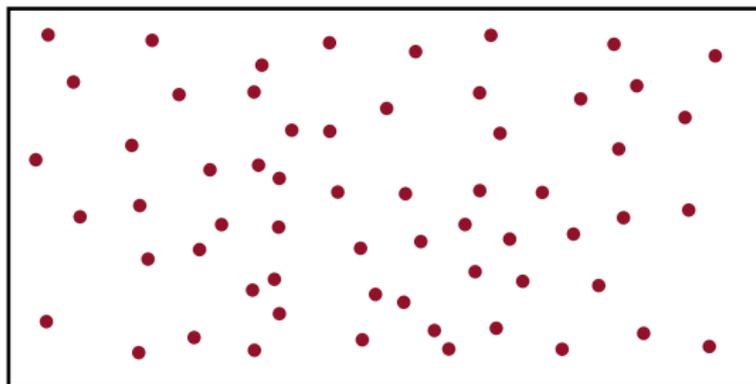
Muitas partículas: modelo microscópico para um gás ideal.

- O gás é formado por partículas rígidas e indestrutíveis;
- as partículas colidem com as paredes do recipiente e, muito raramente, umas com as outras;
- as colisões são (em média) perfeitamente elásticas.

Teoria cinética dos gases ideais

Modelo + Leis de Newton + Estatística \implies Lei dos Gases ideais.

Modelos de Sistemas Físicos - Gás Ideal



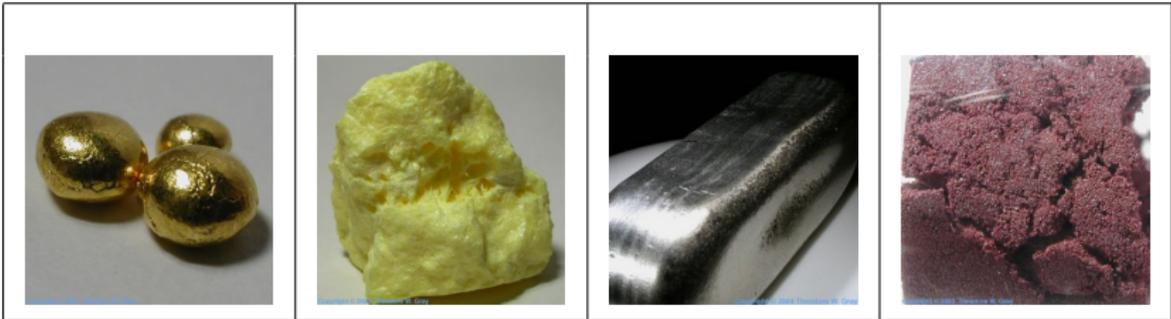
Além de fornecer a lei dos gases ideais, esse modelo simples estabelece uma conexão entre a energia cinética média por partícula do gás e sua temperatura.

Modelos de Sistemas Físicos

O que é comum a todos os exemplos?

- Análise da *fenomenologia*;
- hipóteses simplificadores sobre o sistema;
- escolha de um sistema físico simples “aproximadamente equivalente”;
- aplicação das *leis físicas apropriadas* para encontrar *equações* que descrevam o comportamento do sistema;
- uso das técnicas matemáticas apropriadas para resolver as equações;
- comparação dos resultados com a experiência;
- modificação do modelo para dar conta de características experimentais inicialmente ignoradas.

Elétrons em Sólidos - Fenomenologia



Elétrons em Sólidos - Fenomenologia

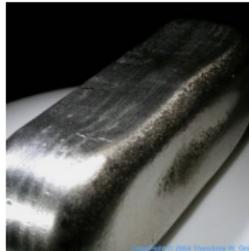
Au



S



Al



P



Elétrons em Sólidos - Fenomenologia

Algumas propriedades importantes:

- Podem ou não conduzir corrente elétrica (*metais* ou *isolantes*);
- conduzem calor com diferentes graus de eficiência (*condutividade térmica*);
- condutividade térmica e condutividade elétrica estão fortemente correlacionadas;
- a variação do calor específico com a temperatura é muito diferente para metais e isolantes;
- metais “brilham”, isolantes não.
- alguns materiais apresentam propriedades magnéticas;
- ...

Elétrons em Metais - Modelo de Drude

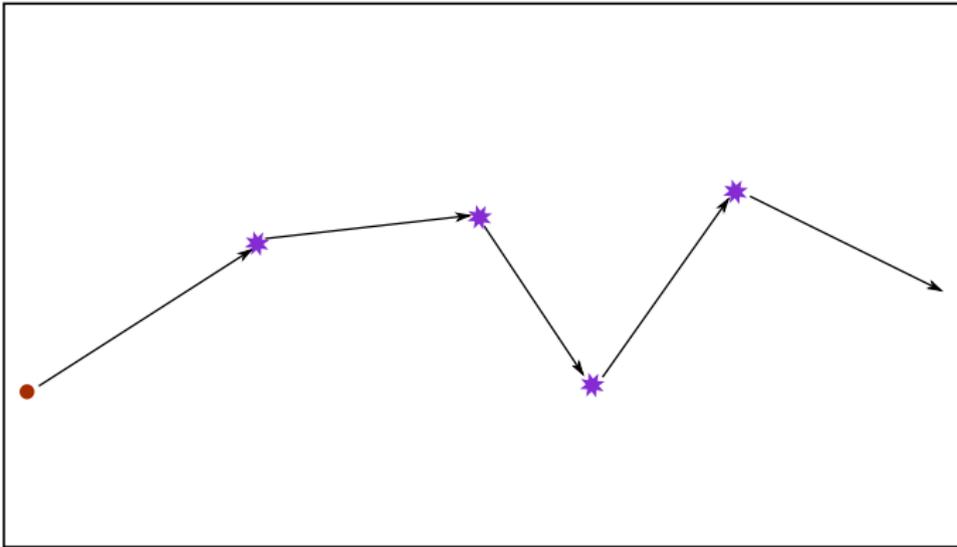
Proposto por **Paul Drude** em 1900 para explicar a condutividade dos metais.

- Elétrons são partículas rígidas;
- formam um gás confinado apenas pelas fronteiras do sólido;
- não interagem uns com os outros;
- quando um campo elétrico é aplicado os elétrons são acelerados na direção do campo;
- os elétrons eventualmente colidem com os íons da rede e uns com os outros;
- As colisões são descritas de forma “efetiva” através de uma *probabilidade de colisão*.

Qual a teoria física apropriada para escrever as equações desse problema?

Elétrons em Metais - Modelo de Drude

Um elétron acelerado pelo campo elétrico externo sofre múltiplos espalhamentos,



Elétrons em Metais - Modelo de Drude

- Drude usou a **mecânica Newtoniana**. Em 1900 ainda não havia outra teoria para descrever o movimento de partículas.
- $N_e \sim 10^{23} \implies$ mecânica Newtoniana + estatística (note a semelhança com a teoria cinética dos gases!)

Os resultados são surpreendentemente bons!

O modelo explica qualitativamente

- a lei de Ohm,
- a condutividade sob um campo elétrico alternado,
- a condutividade térmica dos metais.

Mas...

Problemas no modelo de Drude

- Superestima (em muito!) o calor específico dos metais;
- Superestima a condutividade elétrica;
- não explica a *existência de metais e isolantes*;
- ...

Dúvida!

Os problemas são *do modelo* ou *da teoria*?

O modelo de Drude-Sommerfeld

Por volta de 1933 **Arnold Sommerfeld** introduziu elementos da *mecânica quântica* no modelo proposto por Drude.

- Elétrons são partículas *indistinguíveis*;
- o estado de um elétron é determinado pelo seu momento linear \vec{p} , sua energia E e sua *spin* \vec{s} ;
- é proibido haver dois ou mais elétrons com valores idênticos das três variáveis que caracterizam seus estados (E , \vec{p} e \vec{s}).

O principal elemento, que corrige os resultados “mais errados” de Drude, é o *princípio de exclusão*.

O modelo de Drude-Sommerfeld

Vários “mistérios” permanecem:

- Por que motivo alguns materiais são metais e outros não?
- Em alguns materiais o efeito Hall parece indicar que os portadores de carga têm carga positiva; como isso é possível?
- Como um modelo tão simples fornece resultados tão próximos dos experimentais?
- Como é possível desprezar a interação entre os elétrons e ainda encontrar resultados tão próximos da realidade?

“Incrementando” o modelo de Drude-Sommerfeld

Dois elementos essenciais estão ausentes do modelo:

- os íons (núcleos atômicos mais elétrons “do caroço”),
 - a interação entre os elétrons.
-
- Interação elétron-elétron: complica demais o problema.
 - Íons: dependendo do arranjo geométrico a complicação é aceitável.

Elétrons em sólidos: efeito dos íons

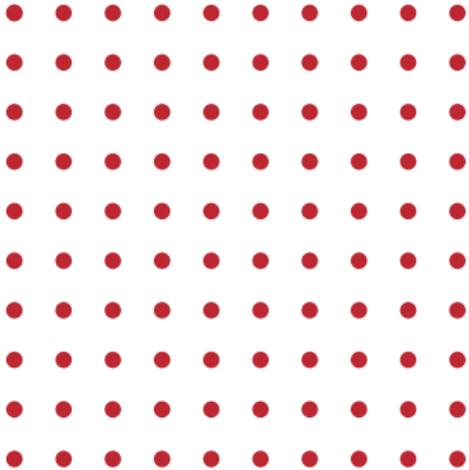
Fenomenologia:

- Evidências experimentais indicam que, em uma grande parte dos sólidos, os íons formam uma estrutura espacial periódica, a *rede cristalina*.
- Em temperaturas próximas e abaixo da temperatura ambiente a distribuição dos íons se desvia pouco da rede cristalina.
- A dinâmica dos íons é muito mais lenta que a dos elétrons

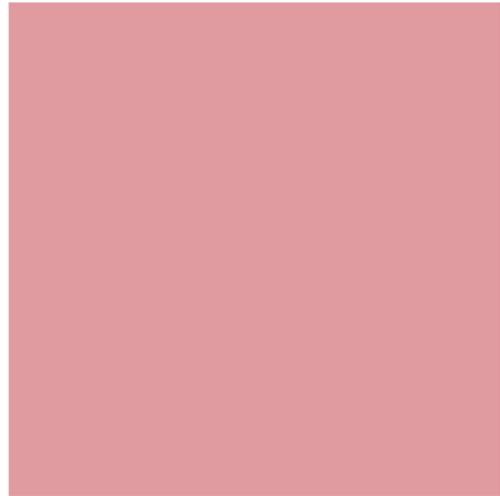
Modelo do potencial periódico

A interação entre os íons da rede cristalina e cada elétron dá origem a uma energia potencial que é periódica no espaço.

Periódico \times Homogêneo



periódico



homogêneo

Modelo do potencial periódico

Mecânica quântica: o movimento eletrônico é descrito por uma equação de onda,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + U(\vec{r})\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

Como ondas se propagam em

- meios homogêneos?
- meios periódicos?

Propagação de Ondas - Meios homogêneos

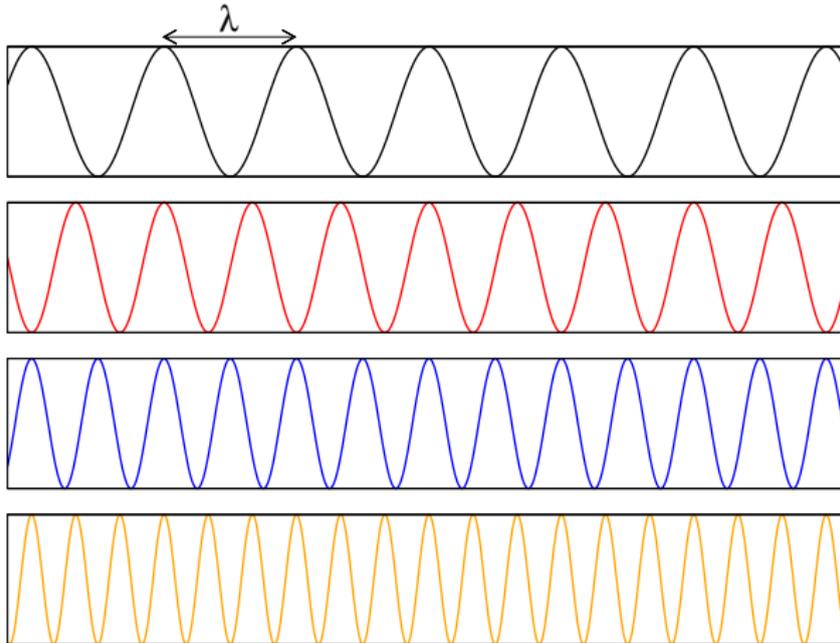
Em meios *homogêneos* as ondas

- podem ter qualquer frequência (comprimento de onda)
- amplitude é a mesma em todos os pontos
- transportam momento e energia entre dois pontos quaisquer do meio sem qualquer impedimento.

Na presença de uma inhomogeneidade,

- são parcialmente refletidas, parcialmente transmitidas,
- a onda refletida interfere com a incidente, produzindo variações de amplitude.

Propagação de Ondas - Meios homogêneos



Propagação de Ondas - Meios periódicos

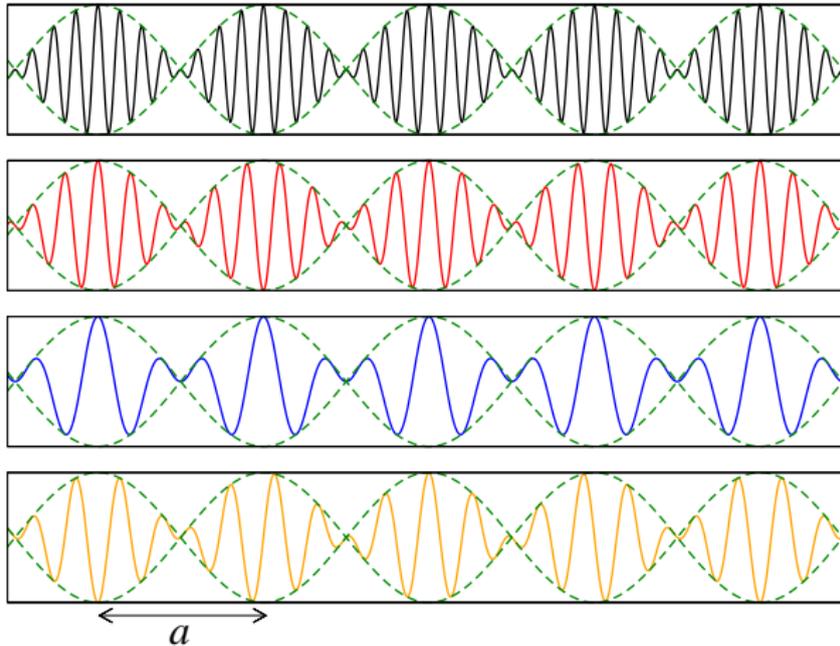
Em meios *periódicos* as ondas

- podem ter frequências (comprimentos de onda) dentro de *faixas* ou *bandas*
- amplitude é modulada pela periodicidade do meio, mas é a mesma em pontos equivalentes do meio.
- Transportam momento e energia entre dois pontos quaisquer do meio sem qualquer impedimento.

Na presença de uma inomogeneidade,

- são parcialmente refletidas, parcialmente transmitidas
- a onda refletida interfere com a incidente, produzindo variações de amplitude

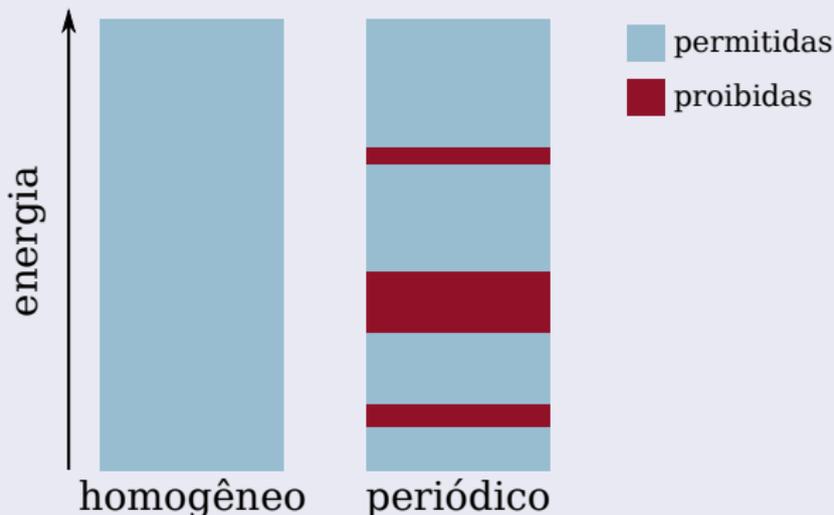
Propagação de Ondas - Meios periódicos



As ondas, os elétrons, os metais e os isolantes

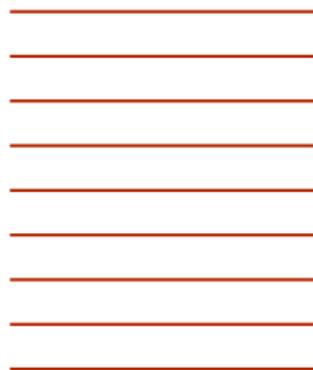
A frequência da onda eletrônica é proporcional à energia do elétron.

As *bandas de energias permitidas* são separadas umas das outras por *intervalos de energias proibidas*.

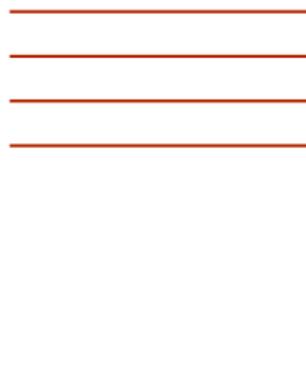


As ondas, os elétrons, os metais e os isolantes

Detalhe da estrutura de níveis próximo a um intervalo proibido:



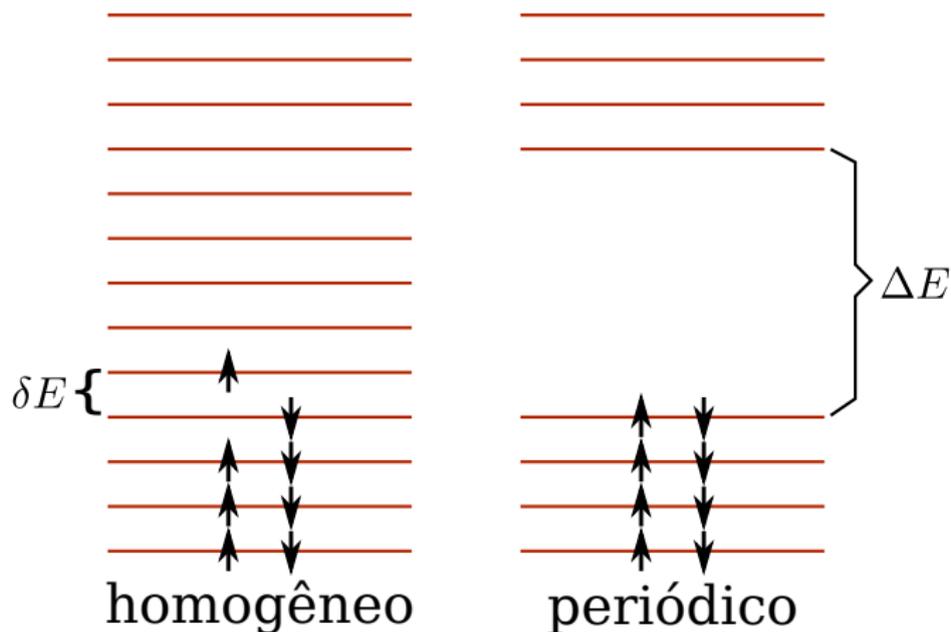
homogêneo



periódico

As ondas, os elétrons, os metais e os isolantes

A força elétrica faz trabalho sobre os elétrons:



As ondas, os elétrons, os metais e os isolantes

Metais:

quando todos os elétrons são acomodados nos estados disponíveis, pelo menos uma banda fica parcialmente vazia.

Isolantes:

quando todos os elétrons são acomodados nos estados disponíveis, nenhuma banda está *parcialmente* preenchida.

Novamente, o princípio de exclusão determina uma propriedade chave dos sólidos!

Comentários finais

- Fenomenologia + leis físicas + (criatividade, inspiração, trabalho, trabalho, trabalho...) → modelo
- Modelo + leis físicas + ferramentas computacionais → explicação de propriedades conhecidas + previsões
- Comparação com resultados experimentais → modificação (ou abandono) do modelo, determinação dos seus limites de validade.

Questões

- 1 O que se pode acrescentar ao modelo do pêndulo simples para torná-lo mais realista, sem complicar demais o problema matemático?
- 2 Quais as contribuições de Drude e Sommerfeld para a compreensão das propriedades dos metais?
- 3 Quais as principais falhas do modelo de Drude-Sommerfeld?