Problemas de electrões em sólidos

Ricardo Mendes Ribeiro

17 de Maio de 2022

Magnetismo em sólidos

1. Utilize as regras de Hund e de Aufbau para determinar L, S e J para os átomos isolados seguintes:
   (a) Enxofre (S) com o número atómico 16.
   (b) Vanádio (V) com o número atómico 23.
   (c) Zircónio (Zr) com o número atómico 40.
   (d) Dysprósio (Dy) com o número atómico 66.

2. Calcule o factor g de Landé para os 11 electrões f do érbio (Er, com o número atómico 68).

3. Calcule o factor g de Landé para os 7 electrões f do európio (Eu, com o número atómico 63).

4. Derive uma fórmula geral para S, L e J em função do momento angular l e do número de electrões n.

5. Considere o hamiltoneano de Heisenberg

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\langle i,j\rangle} J\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j + \sum_i g\mu_B \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{S}_i$$

   Para $J > 0$ (caso ferromagnético), considere os spins todos alinhados. Mostre que é um estado próprio deste hamiltoneano e calcule a sua energia.

6. Considere o hamiltoneano de Heisenberg do exercício anterior, com $J < 0$, e trate os spins como vectores clássicos.

   Se o sistema consistir de apenas três spins nos vértices de um triângulo equilátero mostre que o estado fundamental tem os spins orientados a 120°relativamente ao vizinho.

   Se se tratar de uma rede triangular infinita, como fica o estado fundamental?

7. Considere um modelo de Heisenberg com uma cadeia de apenas dois spins:

$$H = -J\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$$

(a) Supondo que os spins são $S = 1/2$ determine o espectro de energia deste sistema. NOTA: $2\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 = (\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2 - \boldsymbol{S}_1^2 - \boldsymbol{S}_2^2$

(b) Agora considere três spins a formar um triângulo equilátero, calcule o espectro de energia.

(c) Por fim, considere quatro spins a formar um tetraedro.

8. Considere um modelo de Ising a uma dimensão com spin $S = 1$. O hamiltoneano de uma cadeia de N spins é

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1}$$

em que cada σ_i toma o valor ± 1. A função de partição é

$$Z = \sum_{\sigma_1, \ldots, \sigma_N} e^{-\beta H}$$

Use a transformação $R_i = \sigma_i \sigma_{i+1}$ para re-escrever a função de partição como uma soma nas variáveis R, e avalie a função de partição e a energia livre.

9. Suponha um ferromagneto com uma densidade ρ de spins, cada um com momento magnético μ_B.

(a) Suponha que este material tem a forma de um cilindro de raio r e comprimento $L \gg r$. Calcule a energia magnética do sistema quando todos os momentos magnéticos estão alinhados na direção longitudinal. DICA: Um volume de dipolos magnéticos alinhados é equivalente a uma densidade de monopólos magnéticos na sua superfície.

(b) Assuma agora que $L \ll r$. Qual é a energia magnética agora?

10. Sabendo que a energia de uma cristalite é

$$E/V = E_0 - |M||B| \cos\theta - \kappa' |M|^2 \cos^2\theta$$

mostre que existe um mínimo de energia para $|B| < B_{crit}$ no qual a magnetização aponta no sentido oposto ao campo aplicado, e determine esse valor crítico.