UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN

TESE DE DOUTORADO

Coerência Quântica Macroscópica

em

Sistemas Ferromagnéticos

por

Fagner Muruci de Paula

Este exemplar corresponde à redação final da Tese de Doutorado defendida pelo aluno Fagner Muruci de Paula e aprovada pela comissão julgadora

1 Orientador: Amir Ordacgi Caldeira

Campinas, outubro de 2011

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA POR VALKÍRIA SUCCI VICENTE – CRB8/5398 - BIBLIOTECA DO IFGW UNICAMP

P281c	Paula, Fagner Muruci de, 1983- Coerência quântica macroscópica em sistemas ferromagnéticos / Fagner Muruci de Paula Campinas, SP : [s.n.], 2011.
	Orientador: Amir Ordacgi Caldeira. Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".
	 Tunelamento. 2. Macroscópico. Ferromagnetismo. I. Caldeira, Amir Ordacgi, 1950- Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em inglês: Macroscopic quantum coherence in ferromagnetic systems Palavras-chave em inglês: Tunneling Macroscopic Ferromagnetism Área de Concentração: Física Titulação: Doutor em Ciências Banca Examinadora: Amir Ordacgi Caldeira [Orientador] Eduardo Miranda Marcus Aloizio Martinez de Aguiar Frederico Borges de Brito Nei Fernandes de Oliveira Junior Data da Defesa: 29-08-2011 Programa de Pós-Graduação em: Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE FAGNER MURUCI DE PAULA – RA 057568, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN" DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 29/08/2011.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Amir Ørdacgi Caldeira - DFMC/IFGW/UNICAMP

(Orientador do Candidato)

duardo Mirande

Prof. Dr. Eduardo Miranda - DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar - DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Frederico Borges de Brito - DF/UFPE

Prof. Dr. Nei Fernandes de Oliveira Junior - IF/USP

iv

Dedico esta tese à minha esposa Kelly.

vi

Agradecimentos

Gostaria de agradecer:

- Ao IFGW por permitir a realização deste trabalho.
- À CAPES e FAPESP pelo apoio financeiro.
- Ao meu orientador Prof. Dr. Amir O. Caldeira pela interessante proposta de pesquisa, por confiar no meu trabalho e pelas proveitosas discussões.
- Aos companheiros de curso pelo agradável convívio durante esses anos.
- Aos meus pais Fabio e Cléia, meu irmão Fabio Jr. e demais parentes e amigos pelo apoio, incentivo e orações.
- À minha esposa Kelly por estar ao meu lado em todos os momentos, motivandome a concluir esta tese.
- Ao meu Deus pela minha existência, pelos valores que me ensina e por sempre me amparar nas situações difíceis desta vida.

viii

Resumo

Por muitas décadas, fenômenos quânticos foram observados com partículas microscópicas, tais como átomos, elétrons e fótons. No entanto, avanços na fabricação e controle de sistemas físicos com dimensões extremamente reduzidas vêm permitindo a manifestação de eventos quânticos em proporções gigantescas. Por exemplo, existem evidências de superposições quânticas com uma supercorrente composta por bilhões de elétrons num SQUID (Superconducting Quantum Interference Device). Motivados por tais evidências, nosso objetivo reside na busca de novos dispositivos capazes de exibir efeitos quânticos macroscópicos. Em particular, estamos interessados em sistemas ferromagnéticos que manifestem CQM (Coerência Quântica Macroscópica), isto é, ferromagnetos nos quais o campo de magnetização tunela periodicamente no tempo entre dois estados topologicamente distintos e degenerados. Nesta tese, sugerimos dois dispositivos: um fio ferromagnético no qual uma parede de domínio tunela entre dois centros de aprisionamento artificiais; e um MQUID (Magnetic Quantum Interference Device), isto é, um análogo magnético do SQUID que permite efeitos de tunelamento com uma "supercorrente" formada por vórtices de spin. Esses dispositivos são úteis não só na exploração dos limites de validade da mecânica quântica, mas também abrem novas possibilidades de implementação de um bit quântico.

х

Abstract

For many decades, quantum phenomena were observed with microscopic particles, such as atoms, electrons and photons. However, advancements in manufacture and control of physics systems with very small dimensions have allowed verifying quantum events in large proportions. For instance, there are evidences of quantum superposition with a supercurrent formed by billions of electrons on a SQUID (Superconducting Quantum Interference Device). Such evidences have driven our work in a way to investigate new devices that are capable to exhibit macroscopic quantum effects. In particular, we are interested in ferromagnetic systems that present MQC (Macroscopic Quantum Coherence), in other words, ferromagnets in which the magnetization field tunnels periodically in time between two distinct and degenerate topological states. In this thesis, we have suggested two devices: a ferromagnetic wire in which a domain wall tunnels between two artificial pinning centers; and a MQUID (Magnetic Quantum Interference Device) that is a magnetic device analogous to SQUID that permit quantum tunneling effects with a supercurrent formed by spin vortices. These devices are useful to explore the limits of validity of quantum mechanics, as well they open new possibilities to put into operation a quantum bit.

xii

Sumário

1	Inti	roduçã	ίο	1
2	Cor	sidera	ações Gerais	7
	2.1	Introd	lução	7
	2.2	Coerê	ncia Quântica Macroscópica	9
		2.2.1	Regime semiclássico	9
		2.2.2	Instantons	13
		2.2.3	Sistema macroscópico de dois níveis	17
	2.3	Sisten	nas Ferromagnéticos	21
		2.3.1	Estados coerentes de spin	21
		2.3.2	Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico e o limite XY	26
		2.3.3	CQM da magnetização de um domínio ferromagnético	30
	2.4	Conclu	usão	36
3	CQI	M de u	ma Parede de Domínio	39
	3.1	Introd	lução	39
	3.2	Model	0	40
		3.2.1	Ferromagneto quase-1D	40
		3.2.2	Massa de uma parede de domínio	43
		3.2.3	Induzindo uma força constante	45
	3.3	Result	tados e discussão	46
		3.3.1	Mecanismos de aprisionamento	46
		3.3.2	Quantização de energia	49
		3.3.3	CQM	50

SUMÁRIO

MQ	UID
4.1	Introdução
4.2	SQUID
	4.2.1 Anel supercondutor
	4.2.2 Junção Josephson
	4.2.3 CQM no SQUID
4.3	Resultados e discussão
	4.3.1 Anel ferromagnético
	4.3.2 Junção ferromagnética
	4.3.3 CQM no MQUID

5 Conclusão

xiv

Lista de Figuras

1.1	Uma ilustração do paradoxo do gato de Schrödinger (Wikipedia, a enci-	
	clopédia livre. Dhatfield, Schroedingerscat3.jpg, 26-06-2008. Disponível	
	em: http://en.wikipedia.org/wiki/File:Schrodingers_cat.svg. Acesso em:	
	15-07-2011).	2
2.1	Partícula de massa m submetida a um poço duplo de potencial simétrico	
	$U(q)$ cujos mínimos estão situados em $q=q_{\pm}.$	9
2.2	A trajetória verde (amarela) indica o comportamento de um instanton	
	(anti-instanton) de extensão temporal ω^{-1} e centralizado em $ au_0$	14
2.3	Gás diluído de instantons	15
2.4	Níveis de energia do poço duplo de potencial	18
2.5	Poço duplo de potencial assimétrico (à esquerda) e o anti-cruzamento	
	entre os dois primeiros níveis (à direita)	20
2.6	Representação de um vetor de estado coerente n (à esquerda) e a ilus-	
	tração da área A do triângulo esférico de vértices ${f n}_0=\hat{z},{f n}_1$ e ${f n}_2$ (à	
	direita)	22
2.7	Rede de spins semiclássicos.	23
2.8	Uma ilustração do monopolo de Dirac.	25
2.9	Representação dos autoestados de magnetização possíveis, \mathbf{M}_A (seta	
	azul) e \mathbf{M}_B (seta vermelha), de uma partícula ferromagnética (verde)	
	descrita pelo modelo de sine-Gordon. Em temperaturas suficientemente	
	baixas a magnetização exibe CQM, tunelando periodicamente no tempo	
	imaginário entre esses dois estados.	31

2.1	0 Disposição dos estados de magnetização M_A e M_B na presença de um campo magnético paralelo ao eixo y . Quanto maior a intensidade do	
	campo, menor será o ângulo de separação w	33
3.1	Ilustrações dos estados fundamentais de um fio ferromagneto quase-1D descrito pelo modelo de sine-Gordon. O funcional de energia é minimi- zado quando a magnetização aponta para a direção positiva ou negativa do eixo-fácil.	41
3.2	2 Ilustrações dos quatro tipos de paredes de domínio que emergem do mo- delo de sine-Gordon, nas quais $x_0 e \lambda$ representam a posição e o tamanho das paredes, respectivamente, e $\sigma_1 e \sigma_2$ são suas cargas topológicas	42
3.3	B Parede de domínio com carga topológica $\sigma_2 = -1$ (+1) sendo atraída (repelida) por uma força constante $-\mathbf{F}_{cte}$ (\mathbf{F}_{cte}) induzida por um campo externo homogêneo \mathbf{H}_e paralelo ao eixo de fácil-magnetização	46
3.4	Campo magnético (H) aplicado dentro de um pequeno volume (V ₀) do fio e direcionado paralelamente ao campo de magnetização no centro de uma parede de domínio. Neste caso, o campo deve induzir uma força atrativa (F) na parede. Se a direção do campo for invertida, a força será repulsiva.	47
3.5	5 Parede de domínio sendo atraída por um defeito cujo volume V_0 possui um extensão ao longo do fio muito menor que λ (a). Por exemplo, esse defeito pode representar um buraco, uma redução local da área da seção reta transversal ou uma junção (b)	48
3.6	Gráficos de $U_{\alpha}(q)$ em função de q para $\alpha = 1$ (verde) e $\alpha = 2$ (azul). Apro- ximando os potenciais como o de um oscilador harmônico simples (ver- melho), os níveis de energia devem estar separados por uma frequência ω_{oh} dada pela equação 3.31	49
3.7	Parede de domínio de coordenada $q = q(t)$ na presença de dois centros de aprisionamento idênticos separados por uma distância fixa d . Nesta figura, consideramos um campo magnético localizado de intensidade H para representar cada centro de aprisionamento	51
	para representar cada centro de aprisionamento,	01

- 4.1 (a) Representação de um laço Γ interno a um anel supercondutor, onde *d*l denota o elemento infinitesimal de caminho, $\mathbf{j}_{s} = \mathbf{0}$ a densidade de supercorrente e σ a superfície cercada pelo anel. (b) Ilustração do fluxo magnético total Φ aprisionado no interior de um anel supercondutor, o qual pode originar-se de um campo externo \mathbf{B}_{ex} e da supercorrente total *I* que percorre a superfície do supercondutor. 60
- 4.2 Ilustração de uma junção Josephson. Se as funções de onda $\psi_1 e \psi_2$ dos dois supercondutores apresentarem uma diferença de fase $\varphi = \phi_2 \phi_1$ não nula, haverá uma corrente de tunelamento I_{tun} através da junção. . 62

4.5	Estados degenerados de supercorrentes opostas (linhas amarelas orien-	
	tadas). Na presença de um campo magnético perpendicular ao plano do	
	SQUID (símbolo \otimes vermelho), que produz um fluxo externo $n_{ex}=1/2$, a	
	supercorrente deve se encontrar circulando no sentido anti-horário (fi-	
	gura da esquerda) ou horário (figura da direita), de modo que o fluxo to-	
	tal aprisionado mantenha-se no setor topológico $n = 0$ ou $n = 1$, respec-	
	tivamente. Devido a presença da junção Josephson, existe uma barreira	
	finita separando esses setores topologicamente distintos e degenerados,	
	o que possibilita a manifestação do fenômeno da CQM	66
4.6	Anel ferromagnético descrito pelo funcional de energia 4.31	69
4.7	Exemplos de configurações estáticas que minimizam o funcional de ener-	
	gia 4.32, onde $n=0,1$ e 2 representam suas cargas topológicas (vortici-	
	dade)	71
4.8	(a) Junção ferromagnética obtida por meio de uma redução da energia	
	de troca JA para uma pequena quantia $J'A'$ num pequeno pedaço do	
	anel ferromagnético. (b) Neste caso, a condição de continuidade é que-	
	brada e o campo de magnetização no centro da junção deve apresentar	
	uma "diferença de fase" $\varphi = \phi(L/2) - \phi(-L/2)$ capaz de assumir qual-	
	quer valor real.	72
4.9	MQUID	73
4.10	Exemplos de configurações magnéticas do MQUID com cargas topológi-	
	cas fracionárias $q = 1/2, 3/2$ e 5/2	73
4.11	Ilustração do fenômeno da CQM entre os estados de magnetização $n=0$	
	e $n = 1$ (configurações azuis) que ocorre quando $n_D = 1/2$. O estado com	
	carga topológica fracionária $q=1/2$ (configuração vermelha) representa	
	a altura da barreira de energia que separa os setores topológicos $n=0$	
	e $n = 1$	75

Capítulo 1

Introdução

The paradox is only a conflict between reality and your feeling of what reality ought to be (Richard Feynman).



M^{ECÂNICA} QUÂNTICA é uma teoria conhecida por descrever com grande precisão o comportamento de objetos pertencentes ao mundo atômico e subatômico. Ela surgiu essencialmente no início do século XX com a hipótese da quantização de energia introduzida por Max Planck, possibilitando o entendimento de fenômenos até então inexplicáveis pela teoria clássica, tais como a radiação de corpo negro, o efeito fotoelétrico e a estabilidade da matéria [1]. No começo da década 1930, seus alicerces estavam bem estabelecidos. De fato, Wern Heisenberg já havia introduzido em 1925 a descrição matricial [2], Erwin Schrödinger desenvolvido em 1926 a abordagem ondulatória [3], Paul Dirac mostrado um pouco depois em sua tese a equivalência entre ambos os formalismos [4] e John von Neuman havia axiomatizado a teoria em seu livro publicado em 1932 [5]. Esses trabalhos, entre muitos outros, marcaram o início da teoria quântica moderna e a partir desta época diversas interpretações e paradoxos sobre a teoria começaram a surgir.

Dentre todos os paradoxos da teoria quântica, talvez o mais famoso e que ao mesmo tempo confronta com a nossa percepção clássica relativa ao comportamento de objetos macroscópicos refere-se ao paradoxo do gato. Este consiste num experimento mental publicado em 1935 por Schrödinger [6] que descreve a seguinte situação: um gato é confinado numa caixa de aço juntamente com uma pequena quantia de uma substância radioativa com cinquenta por cento de chance de que algum dos seus átomos decaia para um estado de mais baixa energia durante certo intervalo de tempo. Se isso ocorrer, a radiação emitida pelo processo de decaimento aciona um mecanismo "diabólico" (como o da figura 1.1) capaz de quebrar um frasco de gás venenoso e matar o gato rapidamente. Por outro lado, caso nenhum átomo decaia, o gato permanece vivo. De acordo com a teoria quântica, cada átomo radioativo é descrito por uma superposição de estados decaído e não-decaído e, portanto, o gato estaria numa superposição de estados morto e vivo no interior da caixa na ausência de observação.



Figura 1.1: Uma ilustração do paradoxo do gato de Schrödinger (Wikipedia, a enciclopédia livre. Dhatfield, Schroedingerscat3.jpg, 26-06-2008. Disponível em: http://en.wikipedia.org/wiki/File:Schrodingers_cat.svg. Acesso em: 15-07-2011).

A realização do experimento descrito no paradoxo de Schrödinger permaneceu por muito tempo apenas na ficção científica. Porém, a situação mudou no ano de 1980, quando Anthony Leggett previu que seria possível observar fenômenos quânticos numa escala macroscópica utilizando um material supercondutor no lugar de um sistema muito complexo como um gato [7, 8]. O dispositivo mais promissor apontado por Leggett para fazer o papel do gato chama-se SQUID¹, que consiste num anel supercondutor de tamanho micrométrico interrompido por uma junção Josephson. Quando submetido a baixas temperaturas, o SQUID é percorrido por uma supercorrente elétrica formada por um condensado de pares de Cooper que flui ao longo do anel sem experimentar dissipação, e a presença da junção Josephson induz barreiras ínfimas de potencial, controláveis por um campo magnético externo, através das quais a supercorrente pode tunelar. A ideia é que a ação que rege a dinâmica da supercorrente no SQUID torna-se da ordem da constante de Planck quando ambas a temperatura e as dimensões das barreiras são suficientemente reduzidas, permitindo, dessa forma, manifestações de tunelamento em proporções macroscópicas.

Avanços tecnológicos na preparação e manipulação de SQUIDs, bem como a possibilidade de se atingir temperaturas cada vez menores, vêm motivando pesquisadores e possibilitando a observação experimental dos efeitos de tunelamento macroscópico previstos por Leggett [9, 10, 11, 12, 13, 14]. De todos os resultados experimentais, destacam-se os dados apresentados pelo grupo de Jonathan Friedman no ano 2000 [11], os quais revelam uma superposição quântica de dois estados degenerados de supercorrentes contendo bilhões de pares de Cooper fluindo em sentidos opostos. Este efeito é conhecido como Coerência Quântica Macroscópica (CQM) e ocorre sempre que um objeto macroscópico (no caso do SQUID, a supercorrente) oscila via tunelamento quântico entre dois estados macroscopicamente distintos e degenerados. A detecção da CQM no SQUID pelo grupo de Friedman foi realizada indiretamente por meio de uma análise do espectro de energia do sistema. No entanto, em 2010, Agustin Palacios e colaboradores [15, 16] conseguiram uma evidência direta monitorando a evolução temporal da supercorrente num SQUID bem mais sofisticado do que aquele proposto inicialmente por Leggett. A partir dos dados coletados, foi possível observar uma violação da desigualdade de Leggett e Garg [17] e, dessa forma, confirmar a validade do princípio da superposição numa escala macroscópica. É importante ressaltarmos que a CQM serve também como um protótipo de um qubit, isto é, um sistema quântico de dois estados essencial para a construção do tão sonhado computador quântico, e particularmente o SQUID vem se mostrando um forte candidato para tornar esse sonho

¹SQUID significa "Superconducting Quantum Interference Device". Ele é um magnetômetro inventado na década de 1960 com capacidade de medir campos magnéticos extremamente fracos.

em realidade [18, 19].

Fenômenos quânticos macroscópicos não foram observados apenas em SQUIDs, mas também em inúmeros outros sistemas físicos. Como exemplos, podemos citar a superposição de estados de carga em caixas de pares de Cooper [20], difração com macromoléculas orgânicas [21, 22], interferência entre condensados de Bose-Einstein [23], emaranhamento entre amostras macroscópicas de gases [24], superposição quântica de estados de vibração de um microressonador mecânico [25, 26], etc.

Em particular, um tópico interessante de pesquisa tem sido o estudo de fenômenos quânticos macroscópicos em sistemas magnéticos. Os principais efeitos investigados teoricamente nessa área se dividem em três tipos: tunelamento da magnetização de domínios e moléculas magnéticas [27, 28, 29], nucleação quântica de bolhas magnéticas [30, 31, 28] e tunelamento envolvendo tanto a posição como a quiralidade de uma parede de domínio [32, 33, 34]. Alguns desses fenômenos vêm sendo observados experimentalmente em diversos ferromagnetos e antiferromagnetos, incluindo o escape quântico de uma parede de domínio para fora de um centro de aprisionamento em um nanofio de níquel [35], a CQM da magnetização em moléculas como a ferritina [36], Mn_{12} e Fe₈ [37], entre uma vasta gama de evidências.

Nosso objetivo está na busca de novos dispositivos ferromagnéticos potenciais para exibir o fenômeno da CQM, visando a utilização destes como qubits de computadores quânticos, bem como em testes experimentais do limite de validade da mecânica quântica. Nesta tese, encontram-se duas propostas: um fio ferromagnético contendo dois centros de aprisionamento artificiais entre os quais uma parede de domínio tunela, e um dispositivo magnético análogo ao SQUID (isto é, um MQUID²) formado por um anel ferromagnético fechado por uma fraca interação de exchange no qual uma supercorrente de spins tunela entre dois estados com vorticidades distintas.

Para apresentarmos esses novos mecanismos de CQM, organizamos o texto da seguinte maneira: no capítulo 2, abordamos aspectos gerais da CQM e de sistemas ferromagnéticos, incluindo um exemplo simples de tunelamento coerente envolvendo a magnetização de um domínio ferromagnético. No capítulo 3, encontram-se nossos resultados referentes ao problema da CQM de uma parede de domínio induzida por

²MQUID é a sigla que utilizamos para abreviar a expressão "Magnetic Quantum Interference Device".

dois centros de aprisionamento. No capítulo 4, revisamos o funcionamento do SQUID e, logo após, apresentamos nossa proposta de MQUID. Por fim, no capítulo 5, expomos as conclusões e perspectivas.

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO

Capítulo 2

Considerações Gerais

If quantum mechanics hasn't profoundly shocked you, you haven't understood it yet (Niels Bohr).



2.1 Introdução

T^{UNELAMENTO QUÂNTICO é um evento particular da mecânica quântica em que uma partícula penetra numa região cuja energia potencial excede sua energia total. Este efeito é essencial para a compreensão de uma extensa variedade de fenômenos que se manifestam em diferentes ramos da física, incluindo física atômica, altas energias e matéria condensada. Como exemplos, podemos citar o decaimento-alfa de um núcleo [1], a oscilação coerente de uma molécula de amônia [38], o tunelamento entre estados de vácuo em cosmologia [39, 40] e em cromodinâmica quântica [41, 42], o Tunelamento Quântico Macroscópico (TQM) e a Coerência Quântica Macroscópica (CQM) em sistemas de matéria condensada [43].}

No contexto dos fenômenos quânticos macroscópicos, o TQM e a CQM são efeitos bastante investigados. O primeiro é mais fácil de detectar experimentalmente e ocorre quando uma partícula macroscópica encontra-se inicialmente num estado metaestável e passa para um estado contínuo após penetrar por uma barreira de potencial. O segundo caracteriza-se por um tunelamento oscilatório da partícula entre dois poços simétricos (ou quase-simétricos) de energia e a dificuldade de observá-lo reside na sua alta sensibilidade com respeito ao acoplamento da partícula com o meio ao seu redor [44, 45, 46]. Existe também uma classe de fenômenos que está inserida entre TQM e CQM, conhecida como TQRM (Tunelamento Quântico Ressonante Macroscópico), que ocorre quando o nível de energia do estado fundamental de um dos poços coincide com o nível de energia de um estado excitado do outro poço [43].

Em particular, a CQM vem se manifestando em diferentes sistemas físicos [32, 33] e despertando a atenção de um número crescente de pesquisadores. O interesse não é para menos, pois uma partícula apresentando CQM comporta-se efetivamente como um sistema quântico de dois níveis em temperaturas suficientemente baixas, podendo funcionar como um qubit de computação quântica [47] e também ser útil na busca por violações experimentais da desigualdade de Leggett e Garg¹.

Neste capítulo, apresentaremos primeiramente os aspectos gerais do fenômeno da CQM, discutindo as condições necessárias para que uma partícula submetida a um poço duplo de potencial seja efetivamente descrita por um sistema de dois níveis. Partiremos da versão euclidiana do formalismo das integrais de caminho de Feynman, empregando o limite semiclássico e a aproximação do gás diluído de instantons. A segunda parte do capítulo trata de sistemas ferromagnéticos, onde começaremos a nos preocupar com as origens físicas da partícula e do potencial. Trabalhando na base dos estados coerentes de spin e no limite contínuo, mostraremos que o modelo de Heisenberg com uma anisotropia de eixo-fácil e um forte anisotropia planar se reduz ao modelo de sine-Gordon. Em seguida, finalizaremos o capítulo com um exemplo simples de CQM envolvendo a magnetização de um domínio ferromagnético.

¹Essa desigualdade foi introduzida em 1985 por Anthony Leggett e Anupam Garg [48] e leva em conta correlações temporais entre quantidades mensuráveis de um sistema de dois estados. Se tal desigualdade for violada, significa que a evolução temporal do sistema em estudo não pode ser entendida classicamente. Recentemente uma violação foi observada em um SQUID [15], o que forneceu uma evidência direta da validade da mecânica quântica numa escala macroscópica.

2.2 Coerência Quântica Macroscópica

2.2.1 Regime semiclássico

Consideremos uma partícula inicialmente em repouso em um dos pontos estáveis de equilíbrio do poço duplo de potencial simétrico ilustrado na figura 2.1. Desejamos obter as amplitudes de probabilidade de transição da partícula entre os poços, ou seja, os elementos de matriz $G(q_-, q_{\pm}, t) = \langle q_{\pm} | \hat{G} | q_- \rangle = \langle q_- | \hat{G} | q_{\pm} \rangle$ do operador evolução temporal $\hat{G} = e^{-i\hat{H}t}$, onde $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + U(q)$ e $|q_{\pm}\rangle$ denotam o hamiltoniano e os autoestados de posição da partícula, respectivamente².



Figura 2.1: Partícula de massa m submetida a um poço duplo de potencial simétrico U(q) cujos mínimos estão situados em $q = q_{\pm}$.

Expandindo essas amplitudes em função dos autoestados de energia do hamiltoniano, definidos por $\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$, obtemos:

$$G(q_{-}, q_{\pm}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle q_{\pm} | n \rangle \langle n | q_{-} \rangle \ e^{-iE_{n}t}.$$
(2.1)

Queremos investigar o comportamento do objeto no regime de baixas temperaturas $(T \rightarrow 0)$. Neste caso, as contribuições relevantes para as amplitudes surgem dos estados menos energéticos, ou seja, dos primeiros termos da série 2.1. Para encontrálos, utilizaremos a versão euclidiana do formalismo de Feynman da mecânica quântica no limite de tempos longos $(t \rightarrow \infty)$, de acordo com a qual as amplitudes são escritas

²Estamos assumindo $\hbar = 1$.

em função de integrais de caminho, com o tempo real t substituído por um tempo imaginário³ T = it, isto é [49]:

$$G(q_{-}, q_{\pm}, \mathcal{T}) = \int_{q_{-}}^{q_{\pm}} Dq \, e^{-S_{E}[q]}$$
(2.2)

com

$$S_E[q] = \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} d\tau \left\{ \frac{m}{2} (\partial_\tau q)^2 - U_I(q) \right\},$$
(2.3)

onde Dq denota o elemento infinitesimal de uma integração que deve ser realizada sobre todos os caminhos $q = q(\tau)$ conectando a posição inicial $q_- = q(-\mathcal{T}/2)$ ao ponto final $q_{\pm} = q(\mathcal{T}/2)$ durante o intervalo de tempo imaginário $\mathcal{T} \to \infty$, e o funcional $S_E[q]$ representa a denominada ação euclidiana, que governa o movimento da partícula no potencial invertido $U_I(q) = -U(q)$. Nesta formulação, os pontos de equilíbrio q_{\pm} tornam-se instáveis, a barreira de energia transforma-se num poço, e trajetórias clássicas ligando esses pontos ao longo do tempo imaginário τ são obtidas minimizando-se $S_E[q]$.

As amplitudes de probabilidade decaem exponencialmente com o valor da ação euclidiana, que por sua vez cresce com o aumento da massa do objeto. Para uma partícula microscópica, tal como um único átomo, a massa é extremamente pequena e efeitos de tunelamento são facilmente observados. Por outro lado, no caso de um objeto macroscópico, envolvendo um número muito grande de átomos, tem-se em geral uma situação semiclássica ($S_E \gg 1$) na qual o tunelamento passa a ser um evento raro. Estamos interessados nesta última ocasião, onde apenas as trajetórias clássicas no potencial invertido e pequenas flutuações quânticas em torno das mesmas contribuem significativamente para o cálculo da integral de caminho 2.2. Matematicamente, o limite semiclássico é descrito por uma expansão funcional da ação em torno de cada caminho clássico até segunda ordem nas flutuações [49]:

$$S_E[q] \simeq S_E[q_c] + \frac{1}{2} \int d\tau f \,\hat{O}(q_c) f \tag{2.4}$$

³Essa transformação de tempo real para tempo imaginário é conhecida como rotação de Wick, e a palavra euclidiana origina-se do fato de o elemento de linha do espaço de Minskovisk ($\sqrt{dq^2 - dt'^2}, t' \in \mathbb{R}$) adquirir a forma do elemento de linha do espaço de Euclides ($\sqrt{dq^2 + d\tau^2}, \tau = it$) após a transformação.

 com

$$\hat{O}(q_c) = -m\partial_\tau^2 - \partial_q^2 U_I(q_c)$$
(2.5)

e

$$f = q - q_c, \tag{2.6}$$

onde $q_c = q_c(\tau)$ representa uma trajetória clássica, $f = f(\tau) \operatorname{com} f(\pm \infty) = 0$ denota as flutuações, e $\hat{O}(q_c)$ é um operador hermitiano que surge da derivada funcional segunda da ação. De acordo com o princípio da mínima ação, a derivada funcional primeira deve ser nula, implicando na ausência do termo de primeira ordem na expansão 2.4. Levando em conta essa aproximação em 2.2, e substituindo a integral funcional em q por uma soma sobre todos os caminhos clássicos q_c , seguida por uma integração funcional nas respectivas flutuações f, encontramos:

$$G(q_{-}, q_{\pm}, \mathcal{T}) = \sum_{q_c} e^{-S_E[q_c]} \int Df \, e^{-\frac{1}{2} \int d\tau f \, \hat{O}(q_c) \, f}.$$
(2.7)

O próximo passo consiste no cálculo da integral funcional gaussiana na variável f presente na expressão acima. Para obtê-la, primeiramente devemos escrever f na base $\{f_n\}$ composta pelas autofunções ortonormais do operador $\hat{O}(q_c)$, isto é:

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} c_n f_n \tag{2.8}$$

tal que

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau f_n f_m = \delta_{nm}, \qquad (2.9)$$

$$f_n\left(\pm\infty\right) = 0\tag{2.10}$$

e

$$\hat{O}(q_c)f_n = \lambda_n f_n. \tag{2.11}$$

Em seguida, substituindo a integral funcional em f por integrações nos coeficientes c_n , assumindo que todos os autovalores λ_n de $\hat{O}(q_c)$ são positivos⁴, e utilizando as

⁴Essa suposição não é completamente verdadeira, pois existe uma autofunção com autovalor nulo,

relações

$$\int_{-\infty}^{\infty} dc_k \, e^{-\frac{\lambda_k}{2}c_k^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_k}} \tag{2.12}$$

e

$$det\hat{O}(q_c) = \prod_n \lambda_n,$$
(2.13)

obtemos:

$$G(q_{-}, q_{\pm}, \mathcal{T}) = \sum_{q_c} e^{-S[q_c]} \int_{-\infty}^{\infty} dc_0 \int_{-\infty}^{\infty} dc_1 \cdots e^{-\sum_n \frac{\lambda_n}{2} c_n^2} = \mathcal{N} \sum_{q_c} \frac{e^{-S_E[q_c]}}{\sqrt{\det \hat{O}(q_c)}}.$$
 (2.14)

No resultado 2.14, introduzimos um fator de normalização \mathcal{N} que pode ser determinado explorando-se o comportamento da partícula no limite de altas barreiras de energia. Neste limite, o tunelamento é inibido, com a partícula mantendo-se fixa em sua posição inicial em todo instante de tempo. Assim, só existe uma solução clássica, $q_c(\tau) = q_-$, cuja ação euclidiana é nula, $S_E[q_-] = 0$, e o elemento de matriz $G(q_-, q_-, \mathcal{T})$ deve ser aproximadamente igual ao de um oscilador harmônico simples centralizado em q_- , o qual é dado, no limite de tempos longos, por [49]

$$G_{oh}(q_{-}, q_{-}, \mathcal{T}) = |\langle q_{-}|0\rangle_{oh}|^2 \ e^{-E_0^{oh}\mathcal{T}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi}} \ e^{-\frac{\omega}{2}\mathcal{T}},$$
(2.15)

sendo a frequência característica expressa por

$$\omega = \sqrt{\frac{\partial_q^2 U(q_-)}{m}}.$$
(2.16)

Então, comparando as amplitudes 2.14 e 2.15, no caso de um único caminho clássico $q_c = q_-$, chegamos ao fator desejado:

$$\mathcal{N} = \sqrt{\det \hat{O}(q_{-})} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi}} e^{-\frac{\omega}{2}\mathcal{T}}.$$
(2.17)

conhecida como modo zero, e sua contribuição para a integral de caminho deve ser calculada de maneira apropriada, como veremos na próxima seção após analisarmos as possíveis trajetórias clássicas.

2.2.2 Instantons

As trajetórias clássicas são obtidas a partir do princípio da mínima ação, exigindo que a derivada funcional primeira da ação seja nula. Sabemos que essa condição nos conduz à equação de movimento de Euler-Lagrange, que por sua vez nos leva à segunda lei de Newton,

$$m\,\partial_{\tau}^2 q_c = -\partial_q U_I(q_c),\tag{2.18}$$

para ser resolvida sob as condições de contorno

$$q_c(-\infty) = q_-, \qquad q_c(\infty) = q_\pm, \qquad \partial_\tau q_c(-\infty) = 0.$$
 (2.19)

Ao integrarmos a equação de movimento de Newton, chegamos à lei de conservação da energia mecânica. De acordo com as imposições acima, a energia cinética inicial da partícula é nula. Assim, escolhendo um referencial para o potencial tal que $U_I(q_{\pm}) = 0$, a energia mecânica da partícula durante o percurso clássico também deve ser nula, exigindo que a energia cinética seja equivalente ao negativo da energia potencial:

$$\frac{m}{2}(\partial_{\tau}q_{c})^{2} = -U_{I}(q_{c}).$$
(2.20)

Uma solução trivial que satisfaz a relação acima é aquela em que a partícula permanece em sua posição inicial durante todo o tempo, ou seja:

$$q_{c,0}(\tau) = q_{-}.$$
 (2.21)

Outra possibilidade é o caminho clássico conhecido como instanton, que descreve um movimento no potencial invertido no qual a partícula parte do repouso da posição q_- , desce aceleradamente passando com velocidade máxima pelo centro do potencial num instante de tempo arbitrário, e desacelera até atingir novamente o repouso no ponto q_+ , como na figura 2.2. Nas proximidades de q_+ , podemos efetuar a integração da equação 2.20 aproximando o potencial como o de um oscilador harmônico invertido centralizado em q_+ e, assim, concluir que o instanton é uma solução bem localizada no tempo, possuindo um tamanho da ordem do inverso da frequência ω :

(2.22)



Figura 2.2: A trajetória verde (amarela) indica o comportamento de um instanton (anti-instanton) de extensão temporal ω^{-1} e centralizado em τ_0 .

A excursão rápida da partícula entre os pontos q_- e q_+ permite uma solução aproximada geral conhecida como "gás diluído de instantons", que envolve quantidades arbitrárias de instantos não interagentes, descrevendo movimentos de vai e vem no potencial invertido, como indicado no gráfico 2.3; os trajetos ocorrendo do sentido q_+ para q_- são chamados de anti-instantons. Lembrando que as amplitudes de probabilidade 2.14 exigem que contabilizemos todas as possíveis trajetórias clássicas ligando o ponto inicial q_- ao ponto final q_{\pm} , a aproximação do gás diluído de instantons deve ser introduzida da seguinte maneira:

$$G(q_{-}, q_{\pm}, \mathcal{T}) \simeq \mathcal{N} \sum_{n \text{ par/impar}} K^{n} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau_{1} \int_{-\frac{T}{2}}^{\tau_{1}} d\tau_{2} \cdots \int_{-\frac{T}{2}}^{\tau_{n-1}} d\tau_{n} \frac{e^{-S_{E}[q_{c,n}]}}{\sqrt{\det \hat{O}(q_{c,n})}}, \quad (2.23)$$

onde $q_{c,n} = q_{c,n}(\tau) \operatorname{com} n \ge 0$ representa o caminho clássico composto por n instantons centralizados em todos os instantes de tempo tais que $-\mathcal{T}/2 \le \tau_n \dots \le \tau_2 \le \tau_1 \le \mathcal{T}/2$, e o pre-fator K^n absorve a dimensão $[tempo]^n$ introduzida pelas integrações no tempo. Para obtermos a amplitude de transição em que o ponto final reside em $q_-(q_+)$, é necessário considerarmos apenas as trajetórias formadas por um número n par (ímpar) de instantons.



Figura 2.3: Gás diluído de instantons.

Não há acúmulo de ação enquanto a partícula estiver repousando nas posições de equilíbrio q_- e q_+ , mas apenas durante os rápidos movimentos de transição em torno dos centros dos instantons. E como estes não interagem entre si, então a ação correspondente a trajetória clássica $q_{c,n}$ é simplesmente dada por

$$S[q_{c,n}] = n S_1, (2.24)$$

onde

$$S_1 = \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} d\tau \, m(\partial_\tau q_{c,1})^2 = \int_{q_-}^{q_+} dq \, \sqrt{2mU(q)}$$
(2.25)

é a ação associada a um único instanton, que é facilmente obtida com o uso das equações 2.3 e 2.20 sob a condição $q_{c,1}(\pm\infty) = q_{\pm}$. Observe que S_1 é finita e independe da localização do instanton no eixo temporal.

Com respeito às flutuações quânticas em torno de $q_{c,n}$, podemos avaliá-las apenas nos pontos q_- e q_+ , nos quais a partícula passa quase a totalidade do tempo; digamos que as flutuações quânticas em torno dos instantons negligenciadas estejam embutidas no pré-fator K. Isso implica em fazermos a seguinte aproximação:

$$\frac{1}{\sqrt{\det \hat{O}(q_{c,n})}} \simeq \frac{1}{\sqrt{\det \hat{O}(q_{\pm})}}$$
(2.26)

Levando as relações 2.24 e 2.26 em consideração na amplitude 2.23, juntamente com a identidade

$$\int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} d\tau_1 \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\tau_{n-1}} d\tau_n = \frac{\tau^n}{n!},$$
(2.27)

encontramos

$$G(q_{-}, q_{\pm}, \mathcal{T}) = \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{\det \hat{O}(q_{\pm})}} \sum_{n \text{ par/impar}} \frac{1}{n!} \left(\mathcal{T}Ke^{-S_1}\right)^n$$
(2.28)

que em tempo real $t = -i\mathcal{T}$ adquire a forma

$$G(q_{-}, q_{\pm}, t) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi}} e^{-i\frac{\omega t}{2}} \begin{cases} i \sin \frac{\Delta}{2}t \\ \cos \frac{\Delta}{2}t \end{cases},$$
(2.29)

onde definimos

$$\Delta = 2Ke^{-S_1}.\tag{2.30}$$

Necessitamos determinar o pré-fator K para que o cálculo seja concluído. Isso pode ser feito a partir da comparação das equações 2.14 e 2.29 para o caso de um único instanton (n = 1). Dessa forma, obtemos

$$\frac{\mathcal{N} e^{-S_1}}{\sqrt{\det \hat{O}(q_{c,1})}} = \frac{\mathcal{N}\mathcal{T}K e^{-S_1}}{\sqrt{\det \hat{O}(q_{\pm})}}$$
(2.31)

ou

$$K = \frac{1}{\mathcal{T}} \sqrt{\frac{\det \hat{O}(q_{\pm})}{\det \hat{O}(q_{c,1})}}.$$
(2.32)

A princípio, a presença do tempo imaginário $\mathcal{T} \to \infty$ no denominador faz com que K se anule. Porém, como consequência da invariância da equação de movimento 2.18 sob translações no tempo, existe uma autofunção f_0 do operador $\hat{O}(q_{c,1})$ de autovalor λ_0 nulo que ao ser extraído do determinante $det\hat{O}(q_{c,1})$ gera um fator no numerador divergente $\lambda_0^{-1/2} \propto \mathcal{T}$ capaz de cancelar \mathcal{T} no denominador e, assim, manter K finito e não-nulo.

Para provarmos o argumento acima, derivemos a equação de movimento 2.18 com

relação ao tempo imaginário:

$$m\partial_{\tau}^{3}q_{c,1} = -\partial_{\tau}\partial_{q}U_{I}(q_{c,1})$$
(2.33)

ou

$$\hat{O}(q_{c,1}) \,\partial_{\tau} q_{c,1} = 0.$$
 (2.34)

A equação 2.34 nos revela que a derivada temporal do instanton, $\partial_{\tau}q_{c,1}$, é uma autofunção do operador $\hat{O}(q_{c,1})$ com autovalor nulo. Isso significa que $f_0 \propto \partial_{\tau}q_{c,1}$, com a constante de proporcionalidade podendo ser adquirida utilizando as relações 2.9 e 2.25. Dessa maneira, obtemos

$$f_0 = \sqrt{\frac{m}{S_1}} \partial_\tau q_{c,1}. \tag{2.35}$$

Lembre-se que o autovalor nulo foi introduzido em 2.14 via uma integração gaussiana no coeficiente c_0 :

$$\lambda_0^{-1/2} = \int \frac{dc_0}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\lambda_0 c_0^2}{2}} = \int \frac{dc_0}{\sqrt{2\pi}}$$
(2.36)

Das definições 2.6 e 2.8, temos que

$$dq = \partial_{\tau} q_{c,1} \, d\tau_1 = f_0 dc_0, \tag{2.37}$$

implicando em

$$\lambda_0^{-1/2} = \int \sqrt{\frac{S_1}{2\pi m}} d\tau_1 = \sqrt{\frac{S_1}{2\pi m}} \mathcal{T}.$$
 (2.38)

Portanto, levando em conta esse resultado em 2.32, escrevendo $det\hat{O}(q_{c,1}) = \lambda_0 det'\hat{O}(q_{c,1})$, onde a linha no determinante indica a exclusão do autovalor nulo no seu cálculo, encontramos finalmente

$$K = \sqrt{\frac{S_1}{2\pi m}} \sqrt{\frac{\det \hat{O}(q_{\pm})}{\det' \hat{O}(q_{c,1})}}.$$
(2.39)

2.2.3 Sistema macroscópico de dois níveis

Embora os cálculos das amplitudes foram realizados no limite de tempos longos, a decomposição espectral 2.1 nos garante que no regime de baixas energias o resultado 2.29 também é válido para todos os instantes de tempo. Nesse regime, somente os

estados fundamentais dos dois poços de potencial (que estamos representando por $|q_{\pm}\rangle$) são relevantes para a descrição do comportamento quântico da partícula. Assumindo que esses dois estados sejam macroscopicamente distintos, ou seja, que o overlap $\langle q_{-} | q_{+} \rangle$ seja muito pequeno, podemos definir uma base aproximadamente ortonormal $\{|-\rangle, |+\rangle\}$, onde $|\pm\rangle = (m\omega/\pi)^{-1/4} |q_{\pm}\rangle$, na qual a função de onda associada com as amplitudes 2.29 adquire uma simples forma:

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\Delta}{2}t \left|-\right\rangle + i\sin\frac{\Delta}{2}t \left|+\right\rangle, \quad t \ge 0.$$
 (2.40)

Essa função de onda indica que a partícula oscila via tunelamento entre os dois poços, sendo equivalente àquela de um spin-1/2, $\hat{\mathbf{s}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)/2$, na presença de um campo magnético orientado na direção x, $\mathbf{b} = (\Delta, 0, 0)$, com $|\pm\rangle$ fazendo o papel dos autoestados do operador de Pauli $\hat{\sigma}_z$. Isso significa que o sistema é efetivamente descrito pelo hamiltoniano $\hat{H}_{ef} = -\mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{s}}$, o qual é diagonal na base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ composta pelas combinações lineares simétrica e anti-simétrica de $|-\rangle$ e $|+\rangle$:

$$|0\rangle = (|+\rangle + |-\rangle) / \sqrt{2}, \qquad E_0 = -\Delta/2, |1\rangle = (|+\rangle - |-\rangle) / \sqrt{2}, \qquad E_1 = +\Delta/2,$$
(2.41)

onde identificamos

$$\Delta = E_1 - E_0. \tag{2.42}$$



Figura 2.4: Níveis de energia do poço duplo de potencial.

A figura 2.4 esboça o espectro de energia do poço duplo de potencial simétrico. Quando a barreira é infinitamente grande, os poços se comportam como dois osci-
ladores harmônicos independentes, com os níveis de energia separados por ω . Por outro lado, para uma barreira de tamanho finito, cada nível que se encontra abaixo da barreira se transforma em dois estados próximos (um simétrico e um anti-simétrico). Na aproximação de dois níveis, é a diferença de energia Δ que determina completamente a dinâmica quântica do sistema. Quanto maior o valor desse gap, maior será a frequência de tunelamento da partícula entre os dois poços, de acordo com a superposição 2.40.

Para a aproximação de dois estados ser válida é necessário preparar o sistema numa temperatura tal que $k_BT \ll \omega$, de modo que a partícula não tenha energia suficiente para alcançar os demais níveis. Outra condição importante é impedir que a partícula vença a barreira de potencial e, assim, transite de um poço ao outro de maneira clássica. Para isso, é necessário manter a temperatura do sistema abaixo da temperatura de crossover T_c . Esta é definida quando a taxa de transição via flutuação térmica, dada por uma lei de Arrhenius $\Gamma \sim e^{-h/k_BT_c}$ [50], com h denotando a altura da barreira, equipara-se com a taxa de transição via flutuações quânticas, dada pelo gap $\Delta \sim e^{-S_1}$. Igualando os expoentes dessas taxas, encontramos

$$k_B T_c = \frac{h}{S_1}.\tag{2.43}$$

Se o potencial apresenta uma assimetria $\epsilon \ll \omega$ entre os poços, como na figura 2.5, a partícula passa a ter uma probabilidade maior de se localizar no poço menos elevado. Essa assimetria é modelada com a introdução de um campo magnético de módulo ϵ na direção z, isto é, $\hat{H}_{ef} = -\mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{s}}$, assumindo agora $\mathbf{b} = (\Delta, 0, \epsilon)$. Nesta ocasião, os autoestados do hamiltoniano são dados pelas seguintes superposições:

$$\begin{aligned} |0\rangle &= \cos\theta \, |+\rangle + \sin\theta \, |-\rangle \,, \qquad E_0 &= -\Delta(\epsilon)/2, \\ |1\rangle &= \sin\theta \, |+\rangle - \cos\theta \, |-\rangle \,, \qquad E_1 &= +\Delta(\epsilon)/2, \end{aligned}$$

$$(2.44)$$

onde

$$\tan 2\theta = \Delta/\epsilon, \quad \Delta(\epsilon) = \sqrt{\Delta^2 + \epsilon^2}.$$
 (2.45)

O comportamento de $\Delta(\epsilon)$ em função de ϵ é caracterizado por uma "repulsão" entre os níveis, como a indicada na figura 2.5. Para um alto grau de assimetria, $|\epsilon| \gg \Delta$,

tem-se $\Delta(\epsilon) = |\epsilon|$, com $|0\rangle = |+\rangle$ e $|1\rangle = |-\rangle$ para $\epsilon < 0$, e $|0\rangle = |-\rangle$ e $|1\rangle = -|+\rangle$ quando $\epsilon > 0$. No ponto $\epsilon = 0$, a diferença de energia entre os níveis atinge o seu valor mínimo $\Delta(\epsilon = 0) = \Delta$ e os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ se transformam nas superposições expressas em 2.41. Do ponto de vista clássico ($\Delta = 0$), a partícula não exibe tunelamento e os níveis de energia se cruzam.



Figura 2.5: Poço duplo de potencial assimétrico (à esquerda) e o anti-cruzamento entre os dois primeiros níveis (à direita).

De acordo com as equações 2.30 e 2.25, a taxa de tunelamento decai exponencialmente com o valor da massa e com o tamanho da barreira de potencial. O fenômeno da CQM deve envolver o tunelamento oscilatório de um objeto com massa relativamente grande, portanto, recomenda-se fortemente em experimentos que o tamanho da barreira seja o menor possível. Neste caso, é conveniente efetuarmos uma expansão do potencial até a quarta ordem em torno do ponto de máximo $q_m = (q_+ - q_-)/2$. Assumindo um referencial para o potencial de modo que $U(q_{\pm}) = 0$ e $q_- = -q_+$, essa expansão nos conduz ao seguinte resultado:

$$U(q) \simeq h \left\{ 1 - \frac{(q - q_m)^2}{(w/2)^2} \right\}^2$$
(2.46)

com

$$h = U(q_m) \simeq \frac{3}{2} \frac{|\partial_q^2 U(q_m)|^2}{\partial_q^4 U(q_m)}$$
(2.47)

2.3. SISTEMAS FERROMAGNÉTICOS

$$w = q_{+} - q_{-} \simeq \sqrt{\frac{24|\partial_{q}^{2}U(q_{m})|}{\partial_{q}^{4}U(q_{m})}}.$$
 (2.48)

Nas equações acima, $h \in w$ representam, respectivamente, a altura e a largura da barreira de energia, e $\partial_q^k U(q_m)$ denota a k-ésima derivada do potencial avaliada no ponto q_m . Nessa aproximação, a taxa de tunelamento se reduz para [50]

$$\Delta = \omega \sqrt{\frac{24S_1}{\pi}} e^{-S_1} \tag{2.49}$$

com

$$\omega = \sqrt{\frac{32h}{mw^2}} \tag{2.50}$$

 \mathbf{e}

$$S_1 = \frac{16h}{3\omega},\tag{2.51}$$

e a temperatura de crossover adquire a forma

$$k_B T_c = \frac{3}{16}\omega. \tag{2.52}$$

2.3 Sistemas Ferromagnéticos

2.3.1 Estados coerentes de spin

A grandeza fundamental para a descrição de sistemas ferromagnéticos é o spin, $\hat{\mathbf{s}} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$, cujas componentes satisfazem a típica regra de comutação de momento angular, $[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{s}_k$. Tal propriedade reflete o fato de que a direção do spin não pode ser determinada como no caso de um vetor clássico, sendo apenas permitido saber o valor de uma das componentes e o valor do invariante de Casimir $\hat{\mathbf{s}}^2$. O espaço de Hilbert usual de um spin é formado por uma base $\{|s, m_s\rangle\}$ envolvendo os autoestados simultâneos dos operadores \hat{s}_z e $\hat{\mathbf{s}}^2$, sendo definida por meio das seguintes relações de autovalores [51]:

$$\hat{s}_z \left| s, \, m_s \right\rangle = m_s \left| s, \, m_s \right\rangle, \tag{2.53}$$

$$\hat{\mathbf{s}}^2 |s, m_s\rangle = s(s+1) |s, m_s\rangle \tag{2.54}$$

com s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2... e $m_s = -s, -s + 1, ..., s - 1, s$. Para um número quântico s fixo, observe que a base deve conter um total de 2s + 1 estados, de acordo com os valores possíveis de m_s .



Figura 2.6: Representação de um vetor de estado coerente n (à esquerda) e a ilustração da área A do triângulo esférico de vértices $\mathbf{n}_0 = \hat{z}$, $\mathbf{n}_1 \in \mathbf{n}_2$ (à direita).

No limite semiclássico de spin, que ocorre quando *s* atinge valores elevados, é conveniente trocarmos a base $\{|s, m\rangle\}$ por uma outra $\{|n\rangle\}$ composta pelos denominados estados coerentes de spin, para os quais uma formulação de integrais de caminho é bem estabelecida. Cada estado coerente $|n\rangle$ é definido por uma rotação do autoestado máximo de \hat{s}_z ($|s, s\rangle$) na direção de um vetor $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ pertencente à esfera unitária (figura 2.6), e satisfaz as seguintes equações de autovalores [43]:

$$\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{s}} \left| \mathbf{n} \right\rangle = s \left| \mathbf{n} \right\rangle, \tag{2.55}$$

$$\hat{\mathbf{s}}^2 |\mathbf{n}\rangle = s(s+1) |\mathbf{n}\rangle. \tag{2.56}$$

Da equação 2.55, concluímos que a média do operador de spin é um vetor de magnitude *s* e direção n, isto é, $\langle n | \hat{s} | n \rangle = sn$, e a relação 2.56 apenas nos informa sobre a invariância do autovalor de \hat{s}^2 sob mudança de base. Outra propriedade interessante é que esses estados coerentes não são, em geral, ortogonais, já que n pode variar continuamente sobre a esfera unitária, enquanto que existem apenas 2s + 1 autoestados de spin mutualmente ortogonais. Por essa razão, a base $\{|n\rangle\}$ é chamada de supercompleta e pode-se mostrar que o overlap entre dois estados coerentes é dado por [52]

$$\langle \mathbf{n}_2 | \mathbf{n}_1 \rangle = e^{isA} \left(\frac{1 + \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2}{2} \right)^s,$$
 (2.57)

onde *A* representa a área do triângulo esférico cujos vértices estão situados em $\mathbf{n}_0 = \hat{z}$, $\mathbf{n}_1 \in \mathbf{n}_2$ (figura 2.6). Para \mathbf{n}_1 próximo de \mathbf{n}_2 , o overlap 2.57 apresenta uma forma gaussiana, $\langle \mathbf{n}_2 | \mathbf{n}_1 \rangle \sim exp[-s (\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1)^2 / 4]$, que só possui valores apreciáveis quando $|\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1| \lesssim s^{-1/2}$. Portanto, nessa nova base o spin é visto como um vetor clássico cujas flutuações quânticas são da ordem de $s^{-1/2}$.



Figura 2.7: Rede de spins semiclássicos.

Para modelarmos sistemas ferromagnéticos, assumiremos uma rede de spins semiclássicos possuindo um mesmo número quântico *s* e separados por uma distância constante *a*, como na figura 2.7. Se $|\mathbf{n}_{\mathbf{r}_i}\rangle$ denota o estado coerente do sítio *i*, que se encontra posicionado em \mathbf{r}_i , o estado do sistema global é simplesmente descrito por um produto direto envolvendo os estados de todos os sítios da rede, isto é:

$$|\{\mathbf{n}\}\rangle = |\mathbf{n}_{\mathbf{r}_1}\rangle \otimes |\mathbf{n}_{\mathbf{r}_2}\rangle \otimes |\mathbf{n}_{\mathbf{r}_3}\rangle \dots$$
(2.58)

Uma propriedade dos ferromagnetos é que eles apresentam uma magnetização espontânea quando resfriados abaixo da denominada temperatura crítica de Curie. Por exemplo, para amostras puras de ferro (Fe), níquel (Ni) e cobalto (Co), essa temperatura assume os valores 1043 K, 1388 K e 627 K, respectivamente [53]. O ordenamento magnético ocorre principalmente por causa da forte ligação de origem quântica e eletrostática entre spins de sitios magnéticos vizinhos, conhecida como interação de Heisenberg ou acoplamento de troca [54]. Por causa dessa forte interação, em temperaturas muito abaixo da temperatura de Curie as configurações de spin variam suavemente ao longo da rede e, nesta ocasião, é útil trabalharmos na aproximação do contínuo, onde os vetores de spin n_{r_i} são substituídos por um campo contínuo n(r).

No limite contínuo, a amplitude quântica de probabilidade para que um sistema semiclássico de spins transite de um estado $|\{n_A\}\rangle$ para um outro $|\{n_B\}\rangle$ durante um intervalo de tempo imaginário \mathcal{T} é dada por [52, 55]

$$G(\{\mathbf{n}_A\}, \{\mathbf{n}_B\}, \mathcal{T}) = \left\langle \{\mathbf{n}_B\} \left| e^{-\hat{H}\mathcal{T}} \right| \{\mathbf{n}_A\} \right\rangle = \int D\mathbf{n} \, e^{-S_E[\mathbf{n}]}, \quad (2.59)$$

onde

$$S_E[\mathbf{n}] = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \left\{ \int d^3 r \, i \mathbf{A} \cdot \partial_\tau \mathbf{n} + E[\mathbf{n}] \right\}$$
(2.60)

com

$$\mathbf{A} = \frac{1 - \cos\theta}{\gamma \sin\theta} \hat{\phi}, \quad \gamma = a^3/s \tag{2.61}$$

e

$$E[\mathbf{n}] = \left\langle \{\mathbf{n}\} \left| \hat{H} \right| \{\mathbf{n}\} \right\rangle.$$
(2.62)

Na amplitude 2.59, temos $D\mathbf{n} = D\phi Dn_z$, com ϕ e $n_z = \cos\theta$ formando um par de variáveis canonicamente conjugadas, e a integração deve ser realizada sobre todas as configurações do campo $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{r}, \tau)$ que satisfazem as condições de contorno $\mathbf{n}(\mathbf{r}, -\mathcal{T}/2) \rightarrow {\mathbf{n}_A}$ e $\mathbf{n}(\mathbf{r}, \mathcal{T}/2) \rightarrow {\mathbf{n}_B}$. Quando minimizada, a ação euclidiana 2.60 implica na equação clássica de movimento de Landau-Lifshitz,

$$\partial_{\tau} \mathbf{n} = i\gamma \,\mathbf{n} \times \delta_{\mathbf{n}} E,\tag{2.63}$$

onde $\delta_{\mathbf{n}} E$ representa a derivada funcional em relação ao campo n da energia magnética 2.62. Essa energia é obtida pela substituição dos operadores de spin $\{\hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}_i}\}$, presentes no operador hamiltoniano $\hat{H} = \hat{H}(\{\hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}_i}\})$, pelos vetores de estados coerentes $\{\mathbf{n}_{\mathbf{r}_i}\}$, seguida da aplicação do limite contínuo $\mathbf{n}_{\mathbf{r}_i} \to \mathbf{n}(\mathbf{r})$.

2.3. SISTEMAS FERROMAGNÉTICOS

Para um único spin, a parte cinética da ação 2.60 é conhecida como fase de Berry, um termo de origem topológica que ao ser avaliado num percurso fechado Γ pode ser escrito, com o auxílio do teorema de Stokes, como

$$S_{top} = \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} d\tau \, i \mathbf{A} \cdot \partial_{\tau} \mathbf{n} = \oint_{\Gamma} i d\mathbf{n} \cdot \mathbf{A} = i \oint_{A_{\Gamma}} d\sigma \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = is \oint_{A_{\Gamma}} d\sigma \cdot \hat{r} = is A_{\Gamma}, \quad (2.64)$$

onde o elemento de caminho $id\mathbf{n} \cdot \mathbf{A}$ surge do overlap 2.57 entre dois estados coerentes correspondentes à instantes de tempo imaginário adjacentes, e A_{Γ} representa a área sobre a esfera unitária contendo o pólo norte e limitada pelo contorno Γ (figura 2.8). Considerando \mathbf{A} como um potencial vetor, verifica-se que a ação topológica 2.64 é semelhante a de uma partícula de massa unitária e carga s movendo-se sobre a superfície da esfera sob a influência de um campo magnético radial $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = s\hat{r}$ produzido por um monopolo magnético de Dirac com carga 4π e localizado em r = 0. Observe na equação 2.61 que o vetor \mathbf{A} é singular ao longo da linha reta $(r, \theta = \pi)$, com origem no centro da esfera, passando pelo pólo sul e estendendo-se até o infinito. Essa linha representa um solenóide fictício extremamente fino e longo cuja extremidade situada em r = 0 corresponde a fonte do campo magnético radial.



Figura 2.8: Uma ilustração do monopolo de Dirac.

2.3.2 Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico e o limite XY

Além da interação de Heisenberg, os acoplamentos spin-órbita e dipolo-dipolo também são importantes na descrição de ferromagnetos. Esses acoplamentos não são fortes o bastante, em geral, para manter um estado magnetizado, mas são capazes de induzir anisotropias, isto é, direções nas quais a magnetização tende a apontar de forma a minimizar a energia magnética. Um dos hamiltonianos efetivos mais simples que leva em consideração todas essas interações, permitindo tunelamento entre duas configurações distintas de spins, é dado pela seguinte expressão [55]:

$$\hat{H} = -\tilde{J} \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}_{\mathbf{i}}} \cdot \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}_{\mathbf{j}}} - \tilde{K}_{x} \sum_{\mathbf{i}} \hat{s}_{x \mathbf{r}_{\mathbf{i}}}^{2} + \tilde{K}_{z} \sum_{\mathbf{i}} \hat{s}_{z \mathbf{r}_{\mathbf{i}}}^{2}, \qquad (2.65)$$

onde \tilde{J} , $\tilde{K_x}$ e $\tilde{K_z}$ são parâmetros positivos associados com a interação de Heisenberg, anisotropia de eixo-fácil (x) e anisotropia de plano-fácil (xy), respectivamente. Este modelo caracteriza-se, portanto, por uma tendência da magnetização em alinhar-se ao plano xy, apontando preferencialmente para a direção x.

A energia magnética 2.62 correspondente ao hamiltoniano 2.65 é obtida substituindo primeiramente os operadores de spin pelos vetores de estados coerentes, isto é:

$$\left\langle \left\{ \mathbf{n} \right\} \left| \hat{H} \right| \left\{ \mathbf{n} \right\} \right\rangle = \sum_{\mathbf{i}} \left(-\tilde{J}s^2 \, \mathbf{n}_{\mathbf{r}_{\mathbf{i}}} \cdot \sum_{\mathbf{k}=\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}} \mathbf{n}_{\mathbf{r}_{\mathbf{i}}+a\mathbf{k}} - \tilde{K}_x s^2 \, n_{x\,\mathbf{r}_{\mathbf{i}}}^2 + \tilde{K}_z s^2 \, n_{z\,\mathbf{r}_{\mathbf{i}}}^2 \right).$$
(2.66)

Em seguida, é preciso empregar a aproximação do contínuo, efetuando as mudanças $\mathbf{n_{r_i}} \rightarrow \mathbf{n(r)} \in \sum_i \rightarrow \int d^3r/a^3$. Como o desvio entre dois vetores de spin vizinhos é muito pequeno no limite contínuo, podemos realizar uma expansão em série de Taylor de $\mathbf{n(r + ak)}$ em torno de $\mathbf{n(r)}$ até segunda ordem no parâmetro de rede a. Procedendo dessa maneira, obtemos:

$$\mathbf{n}(\mathbf{r} + a\mathbf{k}) \simeq \mathbf{n}(\mathbf{r}) + a \,\partial_k \mathbf{n}(\mathbf{r}) + \frac{a^2}{2} \partial_k^2 \mathbf{n}(\mathbf{r}).$$
(2.67)

Com o uso das relações

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{n}(\mathbf{r} + a\mathbf{k}) = 3\mathbf{n} + a\nabla\mathbf{n} + a^2\nabla^2\mathbf{n},$$
(2.68)

$$\int d^3 r \,\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{n} = -\int d^3 r \,\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{n} = 0 \tag{2.69}$$

e

$$\int d^3 r \,\mathbf{n} \cdot \nabla^2 \mathbf{n} = -\int d^3 r \,(\nabla \mathbf{n})^2 \,, \tag{2.70}$$

onde as duas últimas foram calculadas pelo método de integração por partes, encontramos o seguinte funcional de energia:

$$E[\mathbf{n}] = \int d^3r \left\{ J \left(\nabla \mathbf{n} \right)^2 + K_x (1 - n_x^2) + K_z n_z^2 \right\},$$
(2.71)

no qual definimos $J = \tilde{J}s^2/a$ e $K_{x,z} = \tilde{K_{x,z}}s^2/a^3$ e subtraímos um termo constante de modo que a energia do estado fundamental, descrito por $\mathbf{n} = (\pm 1, 0, 0)$, seja nula e impeça uma divergência da mesma caso tomemos uma ou mais dimensões da rede como infinita. Diversos materiais são modelados por essa energia. Em particular, no caso de nanofios ferromagnéticos os parâmetros assumem os seguintes valores [56]: $J = 4,3 \times 10^{-7}$ erg/cm, $K_x = 2,5 \times 10^4$ erg/cm³ e $K_z = 2,4 \times 10^5$ erg/cm³, para a granada de ítrio e ferro (YIG); $J = 1,0 \times 10^{-6}$ erg/cm, $K_x = 8,0 \times 10^5$ erg/cm³ e $K_z = 1,6 \times 10^6$ erg/cm³, no caso do níquel (Ni); $J = 2,3 \times 10^{-8}$ erg/cm, $K_x = 2,0 \times 10^6$ erg/cm³ e $K_z = 1,6 \times 10^5$ erg/cm³, para o óxido de estrôncio e rutênio (SrRuO₃), entre muitos outros exemplos.

Efeitos de tunelamento são mais pronunciados nos regimes $K_z \gg K_x$ e $K_z \ll K_x$. No primeiro caso, conhecido como limite XY, a forte anisotropia planar inibe o tunelamento no espaço dos "momentos" (n_z) , ampliando as flutuações quânticas no espaço das "posições" (ϕ) . No segundo caso, ocorre o contrário, com o tunelamento no campo n_z sendo maximizado. Estamos interessados no limite XY, onde o comportamento dinâmico dos spins é efetivamente descrito pela teoria de campo de sine-Gordon [42]. Para demonstrarmos isso, explicitemos a amplitude de probabilidade 2.59 em função dos campos canonicamente conjugados ϕ e n_z :

$$G = \int D\phi \int Dn_z \, e^{-S_E[\phi, n_z]},\tag{2.72}$$

onde

$$S_E[\phi, n_z] = S_0[\phi] + \int d\tau \left\{ -\frac{i}{\gamma} \int d^3r \, n_z \partial_\tau \phi + E[\phi, n_z] \right\}$$
(2.73)

com

$$S_0[\phi] = \frac{i}{\gamma} \int d\tau \int d^3r \,\partial_\tau \phi = \frac{i}{\gamma} \int d^3r \,\left\{\phi(\mathbf{r}, \,\mathcal{T}/2) - \phi(\mathbf{r}, \,-\mathcal{T}/2)\right\}$$
(2.74)

e

$$E[\phi, n_z] = \int d^3r \left\{ J \left(\nabla \phi \right)^2 + K_x \sin^2 \phi + \frac{J \left(\nabla n_z \right)^2}{1 - n_z^2} + \left[K_z + K_x \cos^2 \phi - J \left(\nabla \phi \right)^2 \right] n_z^2 \right\}.$$
(2.75)

As equações clássicas de movimento dos campos são dadas pelas equações de hamilton:

$$\partial_{\tau}\phi = -i\gamma\delta_{n_z}E$$
 e $\partial_{\tau}n_z = i\gamma\delta_{\phi}E,$ (2.76)

as quais independem da fase 2.74, por esta envolver apenas uma derivada de primeira ordem. Assim, essa fase pode ser ignorada, salvo em problemas de tunelamento em que há mais de um tipo de instanton ligando os estados $|\{\mathbf{n}_A\}\rangle \in |\{\mathbf{n}_B\}\rangle$. Por exemplo, no tunelamento da magnetização de um domínio ferromagnético, que discutiremos com detalhes na próxima seção, existem dois instantons que geram fases de mesmo módulo e sinais contrários que, sob certas condições, implicam numa interferência quântica totalmente destrutiva, chamada de decoerência topológica.

Na condição $K_z \gg K_x$, uma configuração de spin inicialmente confinada no plano xy deve permanecer aproximadamente neste estado ao longo da dinâmica. Nesta ocasião, podemos assumir $n_z \ll 1$, mantendo termos na energia 2.75 de no máximo segunda ordem em n_z :

$$E[\phi, n_z] \simeq \int d^3r \left\{ J \left(\nabla \phi \right)^2 + K_x \sin^2 \phi + n_z \hat{O} n_z \right\}, \qquad (2.77)$$

2.3. SISTEMAS FERROMAGNÉTICOS

na qual empregamos a aproximação

$$\int d^3r \frac{(\nabla n_z)^2}{1 - n_z^2} \simeq \int d^3r \, (\nabla n_z)^2 = -\int d^3r \, n_z \nabla^2 n_z \tag{2.78}$$

e definimos o operador

$$\hat{O} = K_z \left\{ 1 + \frac{K_x}{K_z} \left[\cos^2 \phi - \lambda^2 \left(\nabla^2 + (\nabla \phi)^2 \right) \right] \right\}$$
(2.79)

com

$$\lambda = \sqrt{J/K_x}.$$
(2.80)

Se os comprimentos de onda de ambos os campos são da ordem ou maiores que λ , o primeiro termo da equação 2.79 domina ($\hat{O} \simeq K_z$) e a primeira equação de movimento em 2.76 desenvolvida com a energia resultante de 2.77 nos conduz à relação

$$n_z \simeq \frac{i}{2\gamma K_z} \partial_\tau \phi. \tag{2.81}$$

Levando essas considerações na amplitude de probabilidade 2.72, obtemos:

$$G = \int D\phi \, e^{-S_E[\phi]} \int Dn_z = \int D\phi \, e^{-S_E[\phi]},\tag{2.82}$$

onde a integral de caminho em n_z resulta num fator constante independente dos campos que pode ser ignorado, com ação efetiva do modelo apresentando uma dependência funcional somente no campo ϕ , dada por

$$S_E[\phi] = S_0[\phi] + \int d\tau \int d^3r \left\{ \frac{2J}{c^2} (\partial_\tau \phi)^2 + E[\phi] \right\}$$
(2.83)

 com

$$E[\phi] = \int d^3r \left\{ -\frac{J}{c^2} (\partial_\tau \phi)^2 + J \left(\nabla \phi\right)^2 + K_x \sin^2 \phi \right\}$$
(2.84)

e

$$c = 2\gamma \sqrt{JK_z}.$$
 (2.85)

Em tempo real, e ignorando a fase 2.74, encontramos a ação invariante de Lorentz da teoria de sine-Gordon,

$$S[\phi] = J \int d^4r \left(\partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{\sin^2 \phi}{\lambda^2} \right), \qquad (2.86)$$

cuja dinâmica do campo é governada pela equação

$$\partial_{\mu}\partial^{\mu}\phi + \frac{\sin 2\phi}{2\lambda^2} = 0.$$
(2.87)

Nessas expressões, $\partial_{\mu} = (\partial_{ct}, \nabla)$ e $\partial^{\mu} = (\partial_{ct}, -\nabla)$ denotam as formas covariante e contravariante do operador gradiente em 3+1 dimensões, respectivamente, com c representando a velocidade dos mágnons (ondas de spin).

2.3.3 CQM da magnetização de um domínio ferromagnético

Quando as dimensões de um ferromagneto são da ordem ou menores que a escala mínima de comprimento $\sqrt{J/K_z}$, não há espaço para formações de paredes de domínio e, então, os momentos de dipolo magnéticos devem permanecer alinhados numa mesma direção durante a dinâmica, resultando em um único domínio de magnetização total macroscópica. Neste caso, o campo ϕ torna-se independente da posição r, ou seja,

$$\phi = \phi(\tau), \tag{2.88}$$

e a magnetização total é descrita por um vetor rígido no plano xy, isto é:

$$\mathbf{M} = M_s \int_V d^3 r \, \mathbf{n} \simeq M_s V \left(\sin \phi, \, \cos \phi, \, 0 \right) \tag{2.89}$$

onde

$$M_s = \frac{\mathbf{g}\mu_B s}{a^3} = \frac{\mathbf{g}\mu_B}{\gamma} \tag{2.90}$$

representa a magnetização de saturação, V denota o volume do domínio e assumimos $n_z\simeq 0.$

Para o ansatz 2.88, a ação euclidiana 2.83 adquire a forma

$$S_E[\phi] = S_0[\phi] + \int d\tau \left\{ \frac{m}{2} (\partial_\tau \phi)^2 + U(\phi) \right\},$$
(2.91)

2.3. SISTEMAS FERROMAGNÉTICOS

de onde extraímos uma massa

$$m = \frac{V}{2\gamma^2 K_z} \tag{2.92}$$

e um potencial

$$U(\phi) = K_x V \sin^2 \phi. \tag{2.93}$$

Portanto, a magnetização comporta-se efetivamente como uma partícula de posição ϕ cuja massa cresce com o volume V e decresce com a anisotropia planar K_z . Essa massa encontra-se sob a ação de um potencial unidimensional periódico no qual os pontos de mínimo são descritos pelos estados de vácuo da teoria de sine-Gordon:

$$\phi_n = n\pi, \quad n \in \mathbb{Z}. \tag{2.94}$$



Figura 2.9: Representação dos autoestados de magnetização possíveis, M_A (seta azul) e M_B (seta vermelha), de uma partícula ferromagnética (verde) descrita pelo modelo de sine-Gordon. Em temperaturas suficientemente baixas a magnetização exibe CQM, tunelando periodicamente no tempo imaginário entre esses dois estados.

Embora haja infinitos pontos de equilíbrio estáveis, fisicamente existem apenas dois autoestados distintos de magnetização; os estados up (M_A) e down (M_B) indicados na figura 2.9. A altura e a largura da barreira de energia que separa estes dois estados são dadas pelas respectivas expressões:

$$h = K_x V \qquad \mathbf{e} \qquad w = \pi. \tag{2.95}$$

Quando $K_x = 0$, a barreira desaparece e, consequentemente, a magnetização deve se comportar como uma partícula livre, podendo apontar para qualquer direção no plano xy. Se há uma barreira finita e não nula, é possível que a magnetização transite de \mathbf{M}_A para \mathbf{M}_B classicamente via flutuações térmicas (fenômeno conhecido como superparamagnetismo) ou quanticamente por meio do efeito túnel. Em baixas temperaturas ($T \leq T_c$), o segundo efeito prevalece sobre o primeiro e, como os estados \mathbf{M}_A e \mathbf{M}_B são energeticamente degenerados, é de se esperar uma manifestação de CQM da magnetização.

Para o cálculo da taxa de tunelamento associada com a CQM da magnetização, o instanton $\phi_{c,1}^{(\sigma)}(\tau)$ deve incluir uma "quiralidade" σ , que pode assumir os valores ± 1 , dependendo se o vetor de magnetização gira no sentido horário ($\phi > 0$) ou antihorário ($\phi < 0$) durante a transição de \mathbf{M}_A ($\phi_{c,1}^{(\sigma)}(-\infty) = 0$) para \mathbf{M}_B ($\phi_{c,1}^{(\sigma)}(+\infty) = \sigma\pi$). De acordo com o formalismo das integrais de caminho, ambas as trajetórias com quiralidades opostas devem ser computadas na amplitude de probabilidade 2.82. Assim, é necessário que a amplitude devido a um único instanton (isto é, o termo n = 1da série 2.28) assuma a forma

$$G_1 \propto \sum_{\sigma=\pm 1} e^{-S_E[\phi_{c,1}^{(\sigma)}]} = \sum_{\sigma=\pm 1} e^{-\left(S_0[\phi_{c,1}^{(\sigma)}] + S_1\right)} = 2\cos\left(\mathcal{S}\pi\right)e^{-S_1},$$
(2.96)

na qual utilizamos a equação 2.74 para o cálculo da fase topológica

$$S_0[\phi_{c,1}^{(\sigma)}] = i\frac{V}{\gamma} \left\{ \phi_{c,1}^{(\sigma)}(+\infty) - \phi_{c,1}^{(\sigma)}\phi(-\infty) \right\} = i\mathcal{S}\sigma$$
(2.97)

e introduzimos a magnitude do spin total

$$S = \frac{V}{\gamma} = s \frac{V}{a^3} = sN,$$
(2.98)

onde N indica o número de sítios magnéticos que compõe o domínio ferromagnético. Se S é inteiro, então $\cos(S\pi) = 1$ e a fase topológica não afeta o comportamento original da amplitude G_1 . Porém, caso S assuma um valor semi-inteiro, teremos $\cos(S\pi) = 0$ e a amplitude se anula. Em outras palavras, essas duas situações são aquelas em que as trajetórias de quiralidades opostas interferem entre si de uma maneira completamente construtiva e destrutiva, respectivamente. No fim das contas, a taxa de tunelamento passa a ser dada por

$$\Delta \sim \omega \sqrt{S_1} |\cos\left(\mathcal{S}\pi\right)| e^{-S_1} \tag{2.99}$$

com a frequência

$$\omega = 2\gamma \sqrt{K_x K_z} \tag{2.100}$$

e a ação do instanton

$$S_1 = 2S\sqrt{\frac{K_x}{K_z}} \tag{2.101}$$

calculadas com o auxílio das relações 2.16 e 2.25. Utilizando a equação 2.43, obtemos também a temperatura de crossover

$$k_B T_c = \frac{\gamma}{2} \sqrt{K_x K_z}.$$
(2.102)

Por exemplo, para um domínio composto de térbio (Tb) ou disprósio (Dy), temos os seguintes valores de parâmetros [32]: $\gamma \sim 10^5 \text{ cm}^3 \text{erg}^{-1} \text{s}^{-1}$, $K_x \sim 10^6 \text{ erg cm}^{-3}$ e $K_z \sim 10^8 \text{ erg cm}^{-3}$, com os quais encontramos $\omega \sim 10^{12} \text{ Hz}$, $T_c \sim 10 \text{ K}$ e $\Delta \sim 10^{12} \sqrt{0,2S} e^{-0,2S}$ (para S inteiro). Neste caso, a taxa de tunelamento pode assumir um valor apreciável, $\Delta \sim 10^4 \text{ Hz}$, para um spin total de magnitude S = 100.



Figura 2.10: Disposição dos estados de magnetização M_A e M_B na presença de um campo magnético paralelo ao eixo y. Quanto maior a intensidade do campo, menor será o ângulo de separação w.

É possível ampliar o valor de S envolvido no tunelamento por meio da aplicação de um campo magnético paralelo ao eixo y (veja a figura 2.9). De fato, o campo tende a diminuir a largura e a altura da barreira de potencial, além disso, se sua intensidade for suficientemente forte, o campo remove o efeito de interferência destrutiva ao quebrar a simetria entre os instantons de quiralidades contrárias, fazendo com que o tunelamento seja permitido também para valores semi-inteiros de S.

A interação de um campo magnético $\mathbf{H} = H\hat{y}$ com a magnetização total \mathbf{M} é descrita por meio da energia Zeeman

$$E_Z(\phi) = -\mathbf{H} \cdot \mathbf{M} = M_s V H \sin \phi, \qquad (2.103)$$

que modifica o potencial 2.93 para

$$U(\phi) = K_x V \sin^2 \phi - M_s V H \sin \phi.$$
(2.104)

Agora, os ângulos de equilíbrio correspondentes aos estados M_A e M_B satisfazem a condição

$$\phi_{A,B} = \arcsin\left(\frac{H}{H_c}\right) \tag{2.105}$$

com

$$H_c = \frac{2K_x}{M_s}.$$
(2.106)

Como esperado, a condição de campo nulo, H = 0, leva aos ângulos de equilíbrio $\phi_A = 0$ e $\phi_B = \pi$, para os quais o tamanho da barreira é máximo. Por outro lado, quando H atinge o valor crítico H_c , ambos os estados se alinham com o campo externo, isto é, $\phi_A = \phi_B = \pi/2$, e a barreira de energia se anula. No limite de pequenas barreiras, $H \simeq H_c$, apenas o instanton de quiralidade positiva é relevante para o cálculo da taxa de tunelamento e, assim, podemos aplicar diretamente as equações desenvolvidas na seção 2.2.3. Utilizando-as, encontramos:

$$h = K_x V \rho^2$$
 e $w = \sqrt{8\rho}$, onde $\rho = 1 - \frac{H}{H_c}$ (2.107)

é um pequeno parâmetro positivo que mede o quão próximo H está de H_c ; note que $H \rightarrow H_c$ implica em $\rho \rightarrow 0$.

2.3. SISTEMAS FERROMAGNÉTICOS

Com as expressões da altura e largura da barreira em mãos, obtemos a taxa de tunelamento

$$\Delta \simeq \omega \sqrt{\frac{24S_1}{\pi}} e^{-S_1} \tag{2.108}$$

com

$$\omega = \sqrt{8\gamma}\sqrt{K_x K_z \rho} \tag{2.109}$$

e

$$S_1 = \frac{4\sqrt{2}}{3} \mathcal{S}\sqrt{\frac{K_x}{K_z}\rho^3},\tag{2.110}$$

e uma temperatura de crossover

$$k_B T_c = \frac{3\sqrt{2}}{8} \gamma \sqrt{K_x K_z \rho}.$$
(2.111)

Para os valores de parâmetros assumidos anteriormente, isto é, $\gamma \sim 10^5 \text{ cm}^3 \text{erg}^{-1} \text{s}^{-1}$, $K_x \sim 10^6 \text{ erg cm}^{-3}$ e $K_z \sim 10^8 \text{ erg cm}^{-3}$, e considerando $\rho \sim 10^{-2}$, correspondente a um ângulo entre os dois estados de w = 16 graus, que é grande o bastante para que um experimental possa distingui-los [32, 33], obtemos: $\omega \sim 10^{11} \text{ Hz}$, $T_c \sim 1 \text{ K e}$ $\Delta \simeq 4 \times 10^{11} \sqrt{S} e^{-1,89 \times 10^{-4}S}$. Por exemplo, para $S = 10^5$ encontramos $\Delta \sim 10^6 \text{ Hz}$.

Para introduzirmos uma assimetria no potencial biestável 2.104, basta adicionarmos um termo Zeeman devido a um campo magnético externo paralelo ao eixo x, dado por

$$E_Z^{(x)}(\phi) \simeq -M_s V H_x \cos \phi. \tag{2.112}$$

Se a intensidade H_x desse campo for suficientemente fraca, de forma que a barreira de energia entre os estados M_A e M_B não seja destruída, então o grau de assimetria entre os dois poços de potencial é simplesmente

$$\epsilon = |E_Z^{(x)}(\phi_A) - E_Z^{(x)}(\phi_B)| \simeq \sqrt{2\rho} \, M_s V H_x.$$
(2.113)

O modelo de tunelamento da magnetização apresentado nesta seção é apenas um exemplo entre muitos outros existentes na literatura [32, 33]. Experimentalmente, a CQM em domínios ferromagnéticos ainda não foi detectada. Há apenas evidências de CQM com domínios antiferromagnéticos, e que envolvem no máximo $N \sim 1000$ sítios magnéticos [36]. Acredita-se que o principal obstáculo seja a decoerência causada pelos acoplamentos dos spins do domínio ferromagnético com outros graus de liberdade, tais como fônons, elétrons de condução, spins nucleares, etc [32, 33]. Essas interações tendem a destruir o gap de tunelamento e localizar rapidamente a magnetização total M em um de seus dois estados clássicos (M_A ou M_B). Para sistemas antiferromagnéticos, o gap atinge valores bem maiores em comparação com o gap de ferromagnetos [32, 33], o que facilita a detecção experimental da CQM nesses sistemas.

2.4 Conclusão

Na primeira parte deste capítulo, discutimos as condições necessárias para que uma partícula macroscópica submetida a um poço duplo de potencial exiba CQM. No limite de pequenas barreiras, mostramos que a grandeza que caracteriza esse fenômeno, a taxa de tunelamento $\Delta \sim \omega \sqrt{S_1} e^{-S_1}$, depende da frequência $\omega \sim (h/mw^2)^{1/2}$ de pequenas oscilações da partícula em torno dos mínimos do potencial e também da ação euclidiana do instanton $S_1 \sim h/\omega$, sendo essas duas grandezas dependentes da massa m da partícula e do tamanho (altura h e largura w) da barreira de potencial. Vimos que a CQM ocorre quando a temperatura se encontra abaixo da temperatura de crossover $T_c \sim \omega/k_B$, e que uma variação da assimetria $\epsilon \ll \omega$ entre os poços deve gerar um anti-cruzamento típico no espectro de energia do sistema.

Em seguida, introduzimos um modelo ferromagnético válido para sistemas semiclássicos de spin que apresentam anisotropias de plano-fácil (K_z) e eixo-fácil (K_x). Trabalhamos no limite continuo e a ênfase foi dada ao limite de forte anisotropia planar, situação na qual o campo de magnetização fica praticamente confinado no planofácil e a ação do modelo se reduz a uma soma da fase de Berry com a ação da teoria de campo de sine-Gordon.

Como um exemplo, investigamos a CQM da magnetização total de um domínio ferromagnético rígido de volume V. Neste caso, vimos que a magnetização total se comporta como uma partícula de massa $m \sim V/K_z$ sob a ação de um potencial periódico que apresenta dois mínimos distintos separados por uma barreira de altura $h = K_x V$ e largura $w = \pi$. Mostramos que a taxa de tunelamento correspondente se anula quando a magnitude do spin total é ímpar, por causa da fase de Berry, mas que esse problema pode ser contornado com a aplicação de um forte campo magnético perpendicular ao eixo-fácil, o qual também gera uma pequena barreira de energia entre os mínimos, permitindo uma ampliação da taxa de tunelamento. Para materiais ferromagnéticos típicos (formados de Tb ou Dy), estimamos que a CQM de um domínio com um spin total de magnitude 10^5 deve ocorrer com uma taxa $\Delta \sim 1$ MHz abaixo de uma temperatura de crossover $T_c \sim 1$ K, e que uma assimetria $\epsilon \propto H_x$ no potencial pode ser induzida por meio de um campo magnético de intensidade H_x paralelo ao eixo-fácil.

CAPÍTULO 2. CONSIDERAÇÕES GERAIS

Capítulo 3

CQM de uma Parede de Domínio

I think and think for months and years. Ninety-nine times, the conclusion is false. The hundredth time I am right (Albert Einstein).



3.1 Introdução

P^{AREDE DE DOMÍNIO é uma interface de spins que separa dois domínios em sistemas magnéticos. Ela pode conter um número muito grande de spins e se comportar como uma partícula massiva, sendo possível acelerá-la via campos magnéticos homogêneos e aprisioná-la por meio de defeitos ou impurezas [28, 32]. Em baixas temperaturas, espera-se que a coordenada do centro-de-massa de uma parede de domínio macroscópica apresente diversos tipos de efeitos quânticos, tais como TQM [57, 58, 56, 59], CQM [60] e estados de Bloch [61], bem como efeitos de tunelamento envolvendo a sua quiralidade [55, 62, 63, 34]. Medidas de relaxação magnética [64] e magnetoresistência [35] fornecem indícios de TQM, enquanto que os demais fenômenos ainda carecem de evidências experimentais.}

Uma das propriedades quânticas mais interessantes que podemos investigar com uma parede de domínio é a CQM, tendo em vista a sua importância na exploração do limite de validade do princípio da superposição [48], além de ser um efeito que serve como um modelo de qubit [47]. Contudo, esse fenômeno recebeu pouca atenção até o momento. Há apenas dados numéricos para a taxa de tunelamento de uma parede de domínio entre dois poços de potencial modelados por duas vacâncias esféricas [60]. Portanto, um cálculo analítico da taxa de tunelamento seria importante para uma melhor compreensão do problema, e a consideração de outros potenciais de aprisionamento além de vacâncias forneceria novas opções para se detectar experimentalmente a CQM.

Nosso objetivo é investigar a CQM de uma parede de domínio. Neste capítulo, assumiremos um fio ferromagnético quase-unidimensional (1D) descrito pelo modelo de sine-Gordon. Veremos que uma parede de domínio emerge como um sóliton do modelo e que uma força constante pode atuar sobre ela por meio de um campo magnético homogêneo. Em seguida, apresentaremos nossos resultados. Primeiramente, introduziremos um centro de aprisionamento geral de parede de domínio e estimaremos a frequência de oscilação característica aproximando o potencial resultante como o de um oscilador harmônico simples. No fim, calcularemos a taxa de tunelamento de uma parede submetida a um poço duplo de potencial gerado por dois centros de aprisionamento empregando o método de instantons discutido no capítulo anterior.

3.2 Modelo

3.2.1 Ferromagneto quase-1D

Em nosso estudo, consideramos um fio ferromagnético quase-1D infinitamente longo de área da seção reta transversal A cuja dinâmica da magnetização é governada pelo modelo de sine-Godon. A aproximação 1D é válida quando as dimensões laterais do fio são inferiores ao comprimento $\sqrt{J/K_z}$, como mostrado por Hans Braun [56], e por convenção assumimos que a direção de fácil-magnetização (eixo x) é paralela ao fio. Neste caso, só há dinâmica na direção x, e o funcional de energia e a equação de movimento adquirem as seguintes formas:

$$E[\phi] = A \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left\{ \frac{J}{c^2} \left(\partial_t \phi\right)^2 + J \left(\partial_x \phi\right)^2 + K_x \sin^2 \phi \right\}$$
(3.1)

e

$$\frac{1}{c^2}\partial_t^2\phi - \partial_x^2\phi + \frac{1}{2\lambda^2}\sin 2\phi = 0.$$
(3.2)

A equação de movimento 3.2 apresenta uma infinidade de soluções triviais que minimizam o funcional de energia 3.1, descritas por

$$\phi_n = n\pi, \quad n \in \mathbb{Z},\tag{3.3}$$

mas fisicamente elas representam apenas duas configurações ferromagnéticas distintas, com a magnetização apontada para o sentido positivo ou negativo do eixo-fácil, como na figura 3.1.



Figura 3.1: Ilustrações dos estados fundamentais de um fio ferromagneto quase-1D descrito pelo modelo de sine-Gordon. O funcional de energia é minimizado quando a magnetização aponta para a direção positiva ou negativa do eixo-fácil.

Existem também soluções solitônicas da equação de movimento que minimizam localmente o funcional de energia. Essas soluções representam paredes de domínio nas quais a configuração de spin faz um giro suave de ângulo π ao longo de um comprimento de tamanho finito do fio. Para encontrarmos o campo $\phi_p(x)$ que descreve uma parede, investiguemos a parte estática da equação de movimento,

$$\partial_x^2 \phi = \frac{\sin 2\phi}{2\lambda^2},\tag{3.4}$$

sob as condições de contorno

$$\partial_x \phi(\pm \infty) = 0, \qquad \phi(\pm \infty) = \phi_n.$$
 (3.5)

CAPÍTULO 3. CQM DE UMA PAREDE DE DOMÍNIO



Figura 3.2: Ilustrações dos quatro tipos de paredes de domínio que emergem do modelo de sine-Gordon, nas quais $x_0 \in \lambda$ representam a posição e o tamanho das paredes, respectivamente, e $\sigma_1 \in \sigma_2$ são suas cargas topológicas.

Observe que a expressão 3.4 é matematicamente equivalente à segunda lei de movimento de Newton para uma partícula fictícia de massa unitária submetida ao potencial $-\sin^2 \phi(x)/2\lambda^2$. De acordo com as imposições em 3.5, a partícula deve se encontrar em repouso em alguma das "posições de equilíbrio instável" ϕ_n do potencial nos "instantes de tempo imaginário" $x \to \pm \infty$. Portanto, temos um problema cuja solução deve ser similar ao instanton discutido no capítulo anterior. Neste caso, a integração da equação 3.4 nos leva ao denominado sóliton:

$$x - x_0 = \pm \int_{\phi(x_0)}^{\phi_p(x)} \frac{d\phi}{\sqrt{2(\sin^2 \phi/2\lambda^2)}}$$
(3.6)

ou

$$\phi_p(x) = -2\sigma_1 \sigma_2 \tan^{-1} e^{\frac{\sigma_2}{\lambda}(x-x_0)},$$
(3.7)

onde os parâmetros x_0 e $\lambda = \sqrt{J/K_x}$ representam o centro e o tamanho do sóliton, respectivamente. Fisicamente, a solução 3.7 descreve quatro tipos de paredes de domínio energeticamente degeneradas que estão rotuladas pelas cargas topológicas $\sigma_1 = \pm 1$ e $\sigma_2 = \pm 1$ (veja a figura 3.2), sendo esta degenerescência uma consequência da invariância do funcional de energia 3.1 sob as transformações $\phi \rightarrow -\phi$ e $\phi \rightarrow \phi + \pi$.

Na figura 3.2, acompanhando o comportamento da magnetização ao longo do sentido positivo do eixo x, notamos que a primeira carga topológica (a quiralidade) nos indica se a parede gira no sentido horário ($\sigma_1 = +1$) ou anti-horário ($\sigma_1 = -1$), enquanto que a segunda carga nos informa se o giro parte do estado fundamental em que a magnetização aponta para o sentido positivo ($\sigma_2 = +1$) ou negativo ($\sigma_2 = -1$) do eixo-fácil.

3.2.2 Massa de uma parede de domínio

O modelo de sine-Gordon é relativístico e, portanto, sólitons se movimentando com velocidades constantes podem ser obtidos da solução estática 3.7 via transformações de Lorentz da coordenada x. No limite XY, a velocidade de uma parede deve ser muito baixa ($\partial_t q \ll c$) e, assim, transformações de Galileu são mais apropriadas. Neste caso, obtemos:

$$\phi_p(x - q(t)) = -2\sigma_1 \sigma_2 \tan^{-1} e^{\frac{\sigma_2}{\lambda}(x - q(t))}$$
(3.8)

com

$$q(t) = x_0 + (\partial_t q)t \tag{3.9}$$

representando a função horária das posições de uma parede em movimento retilíneo e uniforme ao longo do fio. Ao substituir essa solução no funcional 3.1, encontramos a energia de uma parede livre,

$$E_p = \frac{m}{2} \left(\partial_t q\right)^2 + mc^2,$$
 (3.10)

de massa

$$m = \frac{A}{\gamma^2 K_z \lambda} \tag{3.11}$$

e energia de criação

$$mc^2 = 4A\sqrt{JK_x}. (3.12)$$

Em geral, a massa de um objeto é proporcional ao seu volume. No entanto, note que as paredes são exceções a essa regra, pois suas massas crescem com a razão A/λ e não com o volume $V_p = A\lambda$. Para uma área fixa A, isso significa que uma parede torna-se cada vez mais leve à medida que a sua largura λ aumenta. Porém, veremos que a probabilidade de uma parede tunelar por uma barreira decresce com V_p e não com A/λ . Note também que a massa da parede diminui com o aumento do parâmetro de anisotropia planar K_z , assim como ocorre com a massa da magnetização total de um domínio magnético.

É importante ressaltarmos que uma parede de domínio não se encontra livre geralmente num sistema ferromagnético, pois ela tende a interagir com as ondas de spin, que são excitações magnéticas lineares da equação de movimento cuja população cresce com o aumento da temperatura. No entanto, para ferromagnetos descritos pelo modelo de sine-Gordon, as ondas de spin possuem uma relação de dispersão [55]

$$\omega_k = \sqrt{(ck)^2 + \omega_0^2},\tag{3.13}$$

exibindo um gap de anisotropia

$$\omega_0 = \frac{2c}{\lambda} = 4\gamma \sqrt{K_x K_z} \tag{3.14}$$

que existe graças a presença de ambos os parâmetros K_x e K_z . Isso significa que as ondas de spin necessitam de uma energia ω_0 para serem excitadas. Portanto, para temperaturas menores que $T_0 = \omega_0/k_B$, podemos assumir o hamiltoniano de uma parede rígida livre 3.10 sem incluir interações com essas excitações lineares. Por exemplo, para um fio de YIG tem-se $\omega_0 \sim 10^9$ Hz e, neste caso, as ondas de spin são desprezíveis abaixo de $T_0 \sim 0.1$ K [55].

É necessário frisarmos também que as barreiras de energia que separam as diferentes configurações de paredes apresentadas na figura 3.2 são praticamente infinitas, uma vez que estamos considerando um fio infinitamente longo e uma anisotropia planar muito forte. Em outras palavras, as cargas topológicas σ_1 e σ_2 são quantidades conservadas. Com isso, podemos ignorar a fase topológica de uma parede, dada por

$$S_0[\phi_p] = i\frac{A}{\gamma} \int d\tau \int dx \,\partial_\tau \phi_p = -i\sigma_1 \pi \frac{A}{\gamma} \int d\tau \partial_\tau q, \qquad (3.15)$$

que é importante apenas em situações nas quais a quiralidade σ_1 muda de sinal.

3.2.3 Induzindo uma força constante

Uma parede de domínio sofre uma força constante quando submetida a um campo magnético homogêneo aplicado na direção de fácil-magnetização. De fato, a magnetização do fio na presença de um campo magnético tende a alinhar-se com o mesmo, e se a energia de interação envolvida for muito menor que a energia de criação da parede, o campo magnético externo não é capaz de destruí-la, mas lança-a em movimento uniformemente acelerado ao longo do fio.

Para encontramos a expressão da força, devemos evoluir a energia Zeeman considerando um campo externo na direção de fácil-magnetização interagindo com o campo unitário de magnetização de uma parede, isto é:

$$U[\mathbf{n}_p] = -M_s \int_V d^3 r \, \mathbf{H}_e \cdot \mathbf{n}_p \tag{3.16}$$

com

$$\mathbf{H}_e = H_e \hat{x} \tag{3.17}$$

е

$$\mathbf{n}_p \simeq (\cos \phi_p, \sin \phi_p, 0), \tag{3.18}$$

onde a integral deve ser realizada sobre o volume $V = AL \ (L \to \infty)$ da amostra e $n_{p\,z} \simeq 0$ (de acordo com o limite XY). Com isso, chegamos ao potencial de interação

$$U(q) = -2\sigma_2 M_s A H_e q \tag{3.19}$$

correspondente a uma força constante

$$\mathbf{F}_{cte} = 2\sigma_2 M_s A H_e \hat{x}. \tag{3.20}$$

Fazendo uma analogia com o problema de uma partícula eletrizada na presença de um campo elétrico constante, podemos imaginar a parede como um objeto de carga magnética $Q_m = 2\sigma_2 M_s A$ que pode ser atraído ou repelido pelo campo magnético externo dependendo do sinal da carga topológica σ_2 (veja a figura 3.3).



Figura 3.3: Parede de domínio com carga topológica $\sigma_2 = -1$ (+1) sendo atraída (repelida) por uma força constante $-\mathbf{F}_{cte}$ (\mathbf{F}_{cte}) induzida por um campo externo homogêneo \mathbf{H}_e paralelo ao eixo de fácil-magnetização.

3.3 Resultados e discussão

3.3.1 Mecanismos de aprisionamento

Consideremos o problema de uma parede de domínio n_p na presença de um campo magnético constante $\mathbf{H} = H \hat{y}$ aplicado apenas num pequeno volume V_0 centralizado na posição x = 0 do fio ferromagnético. Queremos conhecer o potencial de interação entre a parede e esse campo não-homogêneo. Assim, devemos evoluir a energia Zeeman

$$U_1[\mathbf{n}_p] = -M_s \int_{V_0} d^3 r \, \mathbf{H} \cdot \mathbf{n}_p.$$
(3.21)

Assumindo que essa interação seja fraca o bastante ($\ll mc^2$) para que a parede não se deforme, e considerando que a extensão do volume V_o ao longo do comprimento do fio é pequena o suficiente ($\ll \lambda$) de modo que os spins se encontrem aproximadamente paralelos entre si no interior do mesmo, extraímos um simples potencial de interação

$$U_1(q) = -M_s H_y \int_{V_0} d^3 r \, n_{py} \simeq -M_s H V_0 \left\{ \sin \phi_p \right\}_{x=0} = -\sigma_1 M_s H V_0 \operatorname{sech}\left(\frac{q}{\lambda}\right). \quad (3.22)$$

Observe que esse potencial pode ser atrativo ou repulsivo, dependendo dos sinais da quiralidade σ_1 da parede e da intensidade H do campo. Se σ_1 e H possuem o mesmo sinal, ou seja, se o campo externo for paralelo ao campo de magnetização na região central da parede (como na figura 3.4), o potencial será atrativo. Caso contrário, quando o campo externo e o campo de magnetização no centro da parede são antiparalelos, o potencial é repulsivo.



Figura 3.4: Campo magnético (H) aplicado dentro de um pequeno volume (V_0) do fio e direcionado paralelamente ao campo de magnetização no centro de uma parede de domínio. Neste caso, o campo deve induzir uma força atrativa (F) na parede. Se a direção do campo for invertida, a força será repulsiva.

Uma segunda maneira de aprisionarmos uma parede de domínio é por meio de uma redução local da energia de troca ou dos parâmetros de anisotropia. Para mostrarmos esse efeito de um modo bem simples e geral, consideremos que somente num pequeno volume V_o do fio ferromagnético os parâmetros J, K_x e K_z são modificados para J', K'_x e K'_z . Assim, devemos adicionar ao hamiltoniado da parede um potencial dado pela soma das energias associadas com as variações desses parâmetros, isto é:

$$U_{2}[\mathbf{n}_{p}] = \int_{V_{0}} d^{3}r \left\{ \Delta J \left(\nabla \mathbf{n}_{p} \right)^{2} + \Delta K_{x} (1 - n_{px}^{2}) + \Delta K_{z} n_{pz}^{2} \right\}$$
(3.23)

com

$$\Delta J = J' - J \tag{3.24}$$

e

$$\Delta K_{x,z} = K'_{x,z} - K_{x,z}.$$
(3.25)

Neste caso, impondo as condições de fraco potencial e volume V_o muito pequeno, e desprezando o termo de energia $\Delta K_z n_{pz}^2$ (pois $n_{pz} \simeq 0$ no limite XY), encontramos:

$$U_2(q) \simeq -V_0 \left\{ \Delta J \left(\partial_x \phi_p \right)^2 + \Delta K_x \sin^2 \phi_p \right\}_{x=0} = V_0 \left\{ \frac{\Delta J}{\lambda^2} + \Delta K_x \right\} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{q}{\lambda} \right).$$
(3.26)

Note que esse potencial independe das cargas topológicas, sendo atrativo (repulsivo)

para valores negativos (positivos) das variações $\Delta J \in \Delta K_x$. No caso particular em que há uma redução total de ambos os parâmetros (isto é, $\Delta J = -J \in \Delta K_x = -K_x$), fisicamente o volume V_0 pode representar um buraco ou uma redução na área do fio, ou até mesmo descrever impurezas não-magnéticas. Esse potencial também poderia modelar a interação de uma parede com uma junção na qual o fio é interrompido por uma fina camada de outro material magnético. Esses exemplos encontram-se ilustrados na figura 3.5.

De um modo mais compacto, podemos escrever o potencial de aprisionamento de uma parede como:

$$U_{\alpha}(q) = -U_{\alpha} \operatorname{sech}^{\alpha} \left(\frac{q}{\lambda}\right), \qquad (3.27)$$

onde

$$U_{\alpha} = \begin{cases} M_s V_0 |H| & (\alpha = 1), \\ V_0 \left| \frac{\Delta J}{\lambda^2} + \Delta K_x \right| & (\alpha = 2). \end{cases}$$
(3.28)



Figura 3.5: Parede de domínio sendo atraída por um defeito cujo volume V_0 possui um extensão ao longo do fio muito menor que λ (a). Por exemplo, esse defeito pode representar um buraco, uma redução local da área da seção reta transversal ou uma junção (b).

3.3.2 Quantização de energia

A figura 3.6 esboça os gráficos do potencial $U_{\alpha}(q)$ em função da coordenada q da parede para os dois valores possíveis de α . Embora as reduções de energia no fio ferromagnético ocorram dentro de um volume V_0 extremamente pequeno, um exame nas larguras dos poços de energia na figura 3.6 nos revela que o alcance da interação de $U_{\alpha}(q)$ é da ordem de λ .



Figura 3.6: Gráficos de $U_{\alpha}(q)$ em função de q para $\alpha = 1$ (verde) e $\alpha = 2$ (azul). Aproximando os potenciais como o de um oscilador harmônico simples (vermelho), os níveis de energia devem estar separados por uma frequência ω_{oh} dada pela equação 3.31.

Classicamente, dentro do alcance do potencial a parede deve oscilar em torno do centro de aprisionamento (x = 0) e apresentar um espectro de energia contínuo. Por outro lado, do ponto de vista quântico a energia da parede deve ser quantizada. Na aproximação harmônica simples, os níveis do espectro de energia encontram-se separados por uma frequência

$$\omega_{oh} = \sqrt{\frac{\partial_q^2 U_\alpha(0)}{m}} = \alpha^{1/2} \gamma \sqrt{\frac{U_\alpha K_z}{V_p}}.$$
(3.29)

Observe que essa frequência diminui conforme o volume V_p da parede aumenta, porém, ela cresce com o produto $U_{\alpha}K_z$. Portanto, há possibilidades de se observar o fenômeno da quantização de energia com uma parede de domínio macroscópica, contanto que a intensidade de interação com o centro de aprisionamento e a anisotropia planar sejam suficientemente fortes.

Em termos da razão

$$\mu = U_{\alpha}/mc^2, \tag{3.30}$$

que mede o quão fraca a intensidade do potencial de aprisionamento U_{α} é em relação à energia de criação da parede mc^2 , a frequência passa a apresentar uma dependência com o gap de anisotropia 3.14:

$$\omega_{oh} = \frac{\sqrt{\alpha\mu}}{2}\omega_0. \tag{3.31}$$

Como devemos ter $\mu \ll 1$, para que o centro de aprisionamento não destrua a parede, a equação acima nos revela que $\omega_{oh} \ll \omega_0$. Isso significa que os modos de baixa energia de oscilação da parede não são capazes de excitar as ondas de spin, as quais poderiam interagir com a parede e inibir o efeito de quantização. Por exemplo, para um fio típico de YIG, no qual a parede de domínio envolve cerca de 10^4 spins, o gap de anisotropia é $\omega_0 \simeq 1, 7 \times 10^9$ Hz [56]. Assim, como $\alpha \sim 1$, e escolhendo $\mu \sim 0, 01$, encontramos que os níveis do espectro de energia devem estar separados por uma frequência $\omega_{oh} \sim 10^8$ Hz.

3.3.3 CQM

Com o intuito de obtermos um potencial biestável, investiguemos agora a situação em que a parede de domínio se encontra na presença de dois centros de aprisionamentos idênticos. Assumindo que os centros de aprisionamento estão posicionados em $x = \pm d/2$, de forma que a separação entre eles seja d (como na figura 3.7), o potencial de interação total se expressa como

$$U(q) = -U_{\alpha} \operatorname{sech}^{\alpha} \left(\frac{q + \frac{d}{2}}{\lambda} \right) - U_{\alpha} \operatorname{sech}^{\alpha} \left(\frac{q - \frac{d}{2}}{\lambda} \right).$$
(3.32)

Cada centro de aprisionamento atuando sozinho gera um único poço de potencial centralizado em -d/2 ou +d/2. Com a sobreposição dos dois potenciais, os mínimos do poço duplo resultante se encontram localizados no intervalo aberto (-d/2, d/2), e deve existir uma separação crítica não nula d_c entre os centros de aprisionamento abaixo da qual a barreira de potencial desaparece, com os dois poços se unindo e formando um único poço de potencial.



Figura 3.7: Parede de domínio de coordenada q = q(t) na presença de dois centros de aprisionamento idênticos separados por uma distância fixa d. Nesta figura, consideramos um campo magnético localizado de intensidade H para representar cada centro de aprisionamento.

Quando a barreira de potencial desaparece, significa que o máximo local de U(q)localizado no ponto q = 0 torna-se um mínimo. Portanto, a distância crítica é obtida na condição em que a derivada segunda de U(q) avaliada em q = 0 se anula. Assim, encontramos

$$d_c = n_\alpha \lambda, \tag{3.33}$$

onde definimos

$$n_{\alpha} = 2 \coth^{-1} \sqrt{\alpha + 1}. \tag{3.34}$$

O fator numérico n_{α} é da ordem de 1 ($n_1 \simeq 1,76$ e $n_2 \simeq 1,32$), significando que a distância crítica é da ordem da largura da parede ($d_c \sim \lambda$). Na figura 3.8 plotamos alguns exemplos de gráficos de $U(q)/U_{\alpha}$ em função de q/λ para o caso particular $\alpha = 1$. As curvas preta, verde e azul correspondem aos valores de separação $d = 1, 5\lambda, 2, 5\lambda$ e $3, 5\lambda$, respectivamente. Neste caso, tem-se $d_c \simeq 1,76\lambda$ e, por isso, apenas a curva preta apresenta um único poço de potencial; na situação $\alpha = 2$ as curvas de potencial são similares, havendo um deslocamento da distância crítica para $d_c \simeq 1,32\lambda$.



Figura 3.8: Gráficos correspondentes ao potencial de interação 3.32 de uma parede na presença de dois campos magnéticos localizados e idênticos. As curvas preta, verde e azul foram plotadas para os valores de separação $d = 1, 5\lambda, 2, 5\lambda$ e $3, 5\lambda$, respectivamente. Neste caso, tem-se $\alpha = 1$ e $d_c = 1, 8\lambda$.

A barreira de energia entre os dois poços diminui à medida que a separação d entre os centros de aprisionamento decresce. No limite de pequenas barreiras ($d \simeq d_c$), situação que favorece um tunelamento quântico coerente de uma parede macroscópica, expandimos o potencial 3.32 em torno do ponto q = 0 até a quarta ordem e encontramos um potencial efetivo quártico com a altura e largura da barreira dadas por

$$h = 2^{\frac{3}{2}(\alpha-2)} n_{\alpha}^2 \rho^2 U_{\alpha}, \qquad w = 2^{\frac{5}{4}(2-\alpha)} 3^{\frac{3}{4}(\alpha-1)} n_{\alpha}^{\frac{1}{2}} \rho^{\frac{1}{2}} \lambda, \qquad \rho = \frac{d}{d_c} - 1$$
(3.35)

onde definimos um pequeno parâmetro positivo ρ que mede o quão próximo a separação d entre os centros de aprisionamento está do valor crítico d_c .

Com a massa da parede de domínio em mãos, juntamente com as expressões da altura e da largura da barreira de potencial, aplicamos o método de instantons discutido no capítulo 2 e encontramos uma taxa de tunelamento coerente da parede entre os poços da forma

$$\Delta = \omega \sqrt{\frac{24S_1}{\pi}} e^{-S_1} \tag{3.36}$$

com

$$\omega = 2^{2\alpha - \frac{3}{2}} 3^{\frac{3}{4}(1-\alpha)} n_{\alpha}^{\frac{1}{2}} \gamma \sqrt{\frac{\rho U_{\alpha} K_z}{V_p}}$$
(3.37)

е

$$S_1 = 2^{\frac{1}{2}(5-\alpha)} 3^{\frac{1}{4}(3\alpha-7)} n_{\alpha}^{\frac{3}{2}} \gamma^{-1} \sqrt{\frac{\rho^3 U_{\alpha} V_p}{K_z}},$$
(3.38)

e uma temperatura de crossover dada por

$$k_B T_c = 2^{2\alpha - \frac{11}{2}} 3^{\frac{1}{4}(7-3\alpha)} n_{\alpha}^{\frac{1}{2}} \gamma \sqrt{\frac{\rho U_{\alpha} K_z}{V_p}}.$$
(3.39)

Observe nessas expressões que a frequência ω diminui e ao mesmo tempo a ação do instanton S_1 se eleva conforme o volume da parede V_p aumenta, o que acarreta num decréscimo da taxa de tunelamento Δ . O parâmetro de anisotropia planar K_z implica no efeito inverso, ou seja, ω aumenta e S_1 diminui à medida que K_z cresce, favorecendo grandes valores de Δ . Portanto, concluímos que o fenômeno da CQM envolvendo uma parede macroscópica deve ser mais intenso com ferromagnetos contendo fortes anisotropias de plano-fácil, assim como ocorre no caso da CQM da magnetização de um domínio ferromagnético.

Como exemplo, consideremos um fio de YIG, para o qual tem-se [56]: $\gamma = 1, 7 \times 10^5 \text{cm}^3 \text{erg}^{-1} \text{s}^{-1}$, $V_p = 4, 1 \times 10^{-20} \text{ cm}^3$ (para $A = 5 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$ e $\lambda = 41, 4 \text{ nm}$, com a parede contendo cerca de 10^4 spins), $K_z = 2, 4 \times 10^5$ erg cm⁻³ e $mc^2 = 4, 1 \times 10^{-13}$ erg . Escolhendo $U_1 = 10^{-2}mc^2$ (que pode ser gerado por um campo $H \simeq 100$ G aplicado num volume cilíndrico $V_0 \simeq 15 \text{ nm}^3$ de raio nanométrico) e assumindo $\rho = 0,01$ (equivalente a uma distância entre os poços de w = 13, 1 nm), encontramos uma ação $S_1 = 4, 6$ e uma frequência $\omega \sim 10^8$ Hz (abaixo do gap de anisotropia), que implicam numa taxa de tunelamento $\Delta \sim 10^6$ Hz e uma temperatura de crossover $T_c \sim 1$ mK.

Do ponto de vista experimental, seria mais interessante considerarmos centros de aprisionamento gerados por campos magnéticos locais em lugar de defeitos. De fato, os campos seriam úteis no controle externo tanto da taxa de tunelamento $\Delta = \Delta(H)$, por meio de uma variação das intensidades H, quanto do grau de assimetria $\epsilon \propto (H_1 - H_2)$ do potencial, com a introdução de uma diferença não nula $H_1 - H_2$ entre as mesmas. No caso de dois defeitos, seria possível apenas controlar a assimetria $\epsilon \propto H_e$ via um campo magnético homogêneo $\mathbf{H}_e = H_e \hat{x}$ aplicado na direção de fácilmagnetização. A figura 3.9 resume essas situações.



Figura 3.9: Ilustrações das possíveis maneiras de se controlar externamente o grau de assimetria ϵ e a taxa de tunelamento Δ . No caso de dois defeitos, um campo externo homogêneo \mathbf{H}_e paralelo ao eixo-fácil induz uma assimetria $\epsilon \propto H_e$ (a) e não há meios de se controlar Δ . Com dois campos locais, uma diferença $H_1 - H_2$ entre suas intensidades implica numa assimetria $\epsilon \propto (H_1 - H_2)$ (b). Se as intensidades dos campos variam de um valor H_2 (setas azuis) para outro valor H_1 (setas vermelhas), a altura da barreira de energia decresce e, consequentemente, a taxa Δ diminui (c).

3.4 Conclusão

Neste capítulo, consideramos um fio ferromagnético quase-1D descrito pelo modelo de sine-Gordon. Vimos que uma parede de domínio comporta-se como um sóliton e que sua massa cresce com o aumento da razão entre a sua área e largura, podendo se movimentar livremente em temperaturas suficientemente baixas sem interagir com as ondas de spins, devido ao gap de anisotropia presente no espectro dessas excitações. Mostramos também que a parede possui quiralidade e carga magnética. Dependendo do sinal da carga magnética, a parede pode ser atraída ou repelida por uma força
constante induzida por um campo magnético externo e homogêneo aplicado na direção de fácil-magnetização.

Em seguida, introduzimos um potencial de aprisionamento geral de parede de domínio que pode ser induzido por pequenos buracos, impurezas ou junções no fio, ou até mesmo de maneira externa por meio da aplicação de um campo magnético local paralelo ao vetor de magnetização situado no centro da parede. Aproximando esse potencial como o de um oscilador harmônico simples, calculamos a frequência característica de oscilação da parede e concluímos que essa frequência aumenta com a magnitude do potencial de interação e também com a intensidade do parâmetro de anisotropia planar. Para valores de parâmetros de um fio de YIG contendo uma parede de domínio composta de 10^4 spins, encontramos uma frequência de oscilação $\omega_{oh} \sim 0,1$ GHz bem abaixo da frequência $\omega_0 \sim 1$ GHz correspondente ao gap de anisotropia.

Com a parede na presença de dois potenciais de aprisionamento, investigamos o fenômeno da CQM, e mostramos que há uma distância crítica de separação entre os centros de aprisionamento acima da qual um potencial biestável surge, e que no limite de pequenas barreiras a taxa de tunelamento e a temperatura de crossover crescem principalmente com o aumento da anisotropia planar. Novamente, utilizando como exemplo um fio de YIG com uma parede de domínio formada por 10^4 spins, estimamos uma taxa de tunelamento de $\Delta \sim 1$ MHz para uma temperatura de crossover de $T_c \sim 1$ mK. Do ponto de vista experimental, concluímos que os campos magnéticos externos locais seriam bastante úteis, pois permitiriam o controle externo tanto da altura da barreira de potencial quanto da assimetria entre os poços.

CAPÍTULO 3. CQM DE UMA PAREDE DE DOMÍNIO

Capítulo 4

MQUID

Science cannot solve the ultimate mystery of nature. And that is because, in the last analysis, we ourselves are a part of the mystery that we are trying to solve (Max Planck)



4.1 Introdução

S^{QUID} é a abreviação de "Superconducting Quantum Interference Device", nome atribuído ao magnetômetro inventado na década de 1960 por James Mercereau e colaboradores [65]. Esse dispositivo é formado por um anel supercondutor (tipicamente fabricado com nióbio puro) de tamanho micrométrico interrompido por uma ou mais junções Josephson e possui a capacidade de medir campos magnéticos extremamente fracos, estando presente em técnicas de ressonância magnética nuclear [66], microscopia [67], magnetoencefalografia [68], entre outras. Porém, o SQUID não serve apenas como um medidor de campos magnéticos. Por exemplo, sugestões teóricas recentes indicam que uma linha de transmissão composta por uma rede de SQUIDs poderia simular eventos relacionados com um buraco negro, tal como a radiação Hawking [69], e por meio de uma guia de onda acoplada a um SQUID seria possível também se observar um evento análogo ao efeito Casimir dinâmico [70]. No contexto dos fenômenos quânticos macroscópicos o SQUID também se destaca. Em 1980, Anthony Leggett discutiu sobre as possibilidades de se realizar um experimento análogo ao do gato de Schrödinger e apontou o SQUID como um sistema potencial para manifestações de superposições quânticas macroscópicas [7]. O que torna o SQUID especial é que a supercorrente que flui na superfície do anel supercondutor, que é composta por um condensado de pares de Cooper, não experimenta dissipação, e a presença das junções josephson permite a formações de pequenas barreiras de energia através das quais essa supercorrente tende a tunelar. De fato, desde a proposta de Leggett o SQUID vem exibindo experimentalmente uma variedade fascinante de efeitos quânticos macroscópicos [9, 10, 13, 14], incluindo CQM [11, 12, 15], além de se mostrar um candidato bastante promissor ao cargo de qubit [18, 19].

Neste capítulo, nosso objetivo é propor um dispositivo magnético análogo ao SQUID, isto é, um "Magnetic Quantum Interference Device" (MQUID). Em primeiro lugar, discutiremos sobre a física envolvida no SQUID. Veremos o fenômeno da quantização do fluxo magnético no interior de um anel supercondutor, o funcionamento de uma junção Josephson e, para o caso particular de um SQUID contendo uma única junção, mostraremos que um campo magnético externo é capaz de submeter a supercorrente a uma situação de CQM. Em seguida, extrapolaremos essas ideias para a construção do MQUID, partindo de um anel ferromagnético quase-1D descrito pelo modelo de sine-Gordon no limite de anisotropia de eixo-fácil nula ($K_x \rightarrow 0$). Mostraremos que a adição da interação de Dzyaloshinskii-Moriya no modelo e uma fraca interação de troca num pequeno pedaço do anel desempenham funções similares ao da junção Josephson e do campo magnético externo no SQUID, respectivamente, e permitem um tunelamento coerente entre duas configurações distintas de magnetização.

4.2 SQUID

4.2.1 Anel supercondutor

A supercondutividade foi descoberta em 1911 quando Heike Onnes observou que a resistência elétrica de uma amostra de mercúrio desaparece abruptamente na temperatura de 4,2K [71]. O entendimento microscópico desse fenômeno só foi alcançado em 1957 com a teoria de Bardeen, Cooper e Schrieffer (BCS) [72]. A base dessa teoria é a existência de um gap de energia entre o estado normal e o estado supercondutor, os quais são caracterizados pela presença de elétrons normais e pares de Cooper, respectivamente. Estes últimos comportam-se como bósons e são formados por pares de elétrons de spins opostos que permanecem correlacionados por longas distâncias (~ 10^3 Å) por causa de uma interação atrativa mediada por fônons. Os elétrons quando isolados colidem com a rede cristalina e podem absorver e transferir quantidades arbitrárias de energia, implicando em dissipação e, consequentemente, em resistência elétrica. Por outro lado, os pares de Cooper não sofrem espalhamento e, assim, formase uma supercorrente elétrica imune à dissipação de energia.

Embora todas as propriedades de um supercondutor convencional possam ser deduzidas com a teoria BCS, os efeitos necessários para a compreensão do SQUID são mais facilmente obtidos por meio do parâmetro de ordem da teoria fenomenológica de Ginzburg-Landau [73]. Este parâmetro, dado por

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n_s(\mathbf{r}, t)} e^{i\phi(\mathbf{r}, t)}, \qquad (4.1)$$

representa a função de onda efetiva de um supercondutor, com n_s medindo a densidade de pares de Cooper e ϕ denotando uma fase. A partir dessa função de onda, a densidade de supercorrente é obtida pela expressão $\mathbf{j}_s = q_s \psi^* \hat{\mathbf{v}} \psi$, onde $\hat{\mathbf{v}} = (\hat{\mathbf{p}} - q_s \mathbf{A}) / 2m_s$ é o operador velocidade de um par de Cooper de carga $q_s = 2e$ e massa $m_s = 2m_e$ (sendo e e m_e a carga e a massa de um único elétron) exposto a um campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Assumindo uma densidade n_s constante e lembrando que $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$, encontramos

$$\mathbf{j}_s = \frac{q_s n_s}{2m_s} \left(\nabla \phi - q_s \mathbf{A} \right). \tag{4.2}$$

Logo após, se aplicarmos o rotacional em \mathbf{j}_s e utilizarmos a propriedade $\nabla \times \nabla \phi = 0$, chegamos na denominada equação de London:

$$\mathbf{B} = -\mu_0 \lambda^2 \, \nabla \times \mathbf{j}_s, \qquad \lambda = \sqrt{\frac{2m_s}{n_s \mu_0 q_s^2}}.$$
(4.3)

E com o auxílio da lei de Ampère, $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}_s$, obtemos

$$\nabla^2 \mathbf{j}_{\mathbf{s}} = \mathbf{j}_{\mathbf{s}} / \lambda^2, \qquad \nabla^2 \mathbf{B} = \mathbf{B} / \lambda^2. \tag{4.4}$$

A equação de London nos revela que um campo magnético B aplicado num supercondutor deve induzir uma corrente supercondutora \mathbf{j}_s na superfície do mesmo, produzindo um campo magnético de sentido oposto, $-\mu_0\lambda^2 \nabla \times \mathbf{j}_s$, que cancela B no interior do material. De acordo com as equações diferenciais em 4.4, a intensidade de B, assim como a de \mathbf{j}_s , deve decair exponencialmente ao longo de uma distância característica λ a partir da superfície do supercondutor. Essa expulsão de campos magnéticos no interior dos materiais supercondutores é conhecida como efeito Meissner e mostra que os supercondutores não são apenas condutores ideais, mas também diamagnetos perfeitos.



Figura 4.1: (a) Representação de um laço Γ interno a um anel supercondutor, onde dl denota o elemento infinitesimal de caminho, $\mathbf{j}_{s} = \mathbf{0}$ a densidade de supercorrente e σ a superfície cercada pelo anel. (b) Ilustração do fluxo magnético total Φ aprisionado no interior de um anel supercondutor, o qual pode originar-se de um campo externo \mathbf{B}_{ex} e da supercorrente total I que percorre a superfície do supercondutor.

Vejamos o que acontece quando uma supercorrente flui por um anel supercondutor. Nesta ocasião, a propriedade de continuidade do parâmetro de ordem 4.1 requer que a soma da diferença de fase ao longo de um caminho fechado Γ pertencente ao anel (como o da figura 4.1) seja um múltiplo inteiro de 2π , isto é, $\oint_{\Gamma} d\phi = 2\pi n$ ($n \in \mathbb{Z}$). Se dl denota o elemento infinitesimal de comprimento pertencente ao laço Γ , a condição de continuidade pode ser reescrita como

$$\oint_{\Gamma} \nabla \phi \cdot d\mathbf{l} = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}.$$
(4.5)

Utilizando a relação 4.2, o gradiente da fase $\nabla \phi$ presente na integração acima pode ser escrito em função de um termo contendo a densidade de supercorrente j_s somado a uma parte proporcional ao potencial vetor A. Como consequência do efeito Meissner, a escolha de um caminho Γ bem interno ao supercondutor exige que a parte dependente de j_s se anule e, dessa maneira, obtemos a condição $q_s \oint_{\Gamma} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = 2\pi n$. De acordo com o teorema de Stokes, a integral em A é equivalente ao fluxo $\Phi = \int_{\sigma} \mathbf{B} \cdot d\sigma$ de um campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ através da superfície σ cercada pelo anel (veja a figura 4.1) e, assim, chegamos na seguinte regra de quantização:

$$\Phi = n \Phi_0, \qquad \Phi_0 = 2\pi/q_s. \tag{4.6}$$

Portanto, o fluxo aprisionado no interior do anel é quantizado e só pode assumir valores inteiros do fluxo elementar $\Phi_0 \sim 10^{-15}$ Wb, o qual é conhecido como fluxon.

Calculemos agora a energia magnética armazenada pelo anel. Sabemos que o fluxo total $\Phi = \Phi_{ex} + \Phi_{in}$ é composto por uma parte $\Phi_{ex} = \int_{\sigma} \mathbf{B}_{ex} \cdot d\sigma$ devido a um campo magnético externo \mathbf{B}_{ex} e uma componente interna $\Phi_{in} = \mathcal{L}I$ oriunda da supercorrente total I que percorre a superfície de um anel de auto-indutância \mathcal{L} . De acordo com o eletromagnetismo básico, a energia magnética é simplesmente $E_{mag} = \mathcal{L}I^2/2 = \Phi_{in}^2/2\mathcal{L}$ e, assim, encontramos

$$E_{mag} = E_0 \left(n - n_{ex} \right)^2, \qquad E_0 = \Phi_0^2 / 2\mathcal{L}, \qquad n_{ex} = \Phi_{ex} / \Phi_0,$$
 (4.7)

onde E_0 representa a energia correspondente a um único fluxon e n_{ex} mede o valor do fluxo externo em unidades de fluxons. Então, concluímos que a energia da supercorrente que percorre um anel supercondutor deve ser quantizada, e que um campo magnético externo pode ser utilizado para deslocar os níveis de energia.

4.2.2 Junção Josephson

A junção Josephson é um isolante extremamente fino (~ 10 Å) ensanduichado por dois supercondutores, como na figura 4.2. Nesse arranjo, só pode haver manifestação de corrente via tunelamento de pares de Cooper, um fenômeno previsto em 1962 por Josephson [74], comprovado um ano mais tarde por Anderson e Rowell [75], e que ficou conhecido como efeito Josephson.



Figura 4.2: Ilustração de uma junção Josephson. Se as funções de onda ψ_1 e ψ_2 dos dois supercondutores apresentarem uma diferença de fase $\varphi = \phi_2 - \phi_1$ não nula, haverá uma corrente de tunelamento I_{tun} através da junção.

A corrente de tunelamento não necessita de uma voltagem para ser gerada, mas depende apenas da existência de uma diferença de fase não nula entre os dois supercondutores. Para demonstrarmos essa propriedade, escrevamos as equações de Schrödinger associadas com os dois supercondutores [76]:

$$i\partial_t \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & K \\ K & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \qquad (4.8)$$

onde a energia $E_{1(2)}$ e a função de onda $\psi_{1(2)} = \sqrt{n_{1(2)}} e^{i\phi_{1(2)}}$ correspondem ao supercondutor 1(2) e $K \in \mathbb{R}$ é um pequeno parâmetro que modela a interferência entre ψ_1 e ψ_2 , ou seja, ele mede o grau de tunelamento dos pares de Cooper através da junção; se K é nulo, observe que a relação acima acarreta em duas equações de Schrödinger independentes, descrevendo uma situação em que os dois supercondutores se encontram muito afastados.

Em seguida, assumindo $n_1 \simeq n_2 = n_s$ e definindo a diferença de fase entre os supercondutores por $\varphi = \phi_2 - \phi_1$, a expressão 4.8 simplifica-se para

$$\partial_t n_s = 2K n_s \sin \varphi, \tag{4.9}$$

$$\partial_t \varphi = E_2 - E_1. \tag{4.10}$$

A diferença de energia E_2-E_1 é equivalente ao trabalho q_sV necessário para transportar um par de Cooper de carga q_s através da junção sob uma diferença de potencial V entre os dois supercondutores, enquanto que a variação temporal da densidade de pares n_s nos dá a densidade de corrente de tunelamento j_{tun} . Assim, somos conduzidos aos efeitos Josephson AC e DC, descritos respectivamente por

$$I_{tun} = I_c \sin \varphi, \tag{4.11}$$

$$\partial_t \varphi = q_s V = \frac{2\pi}{\Phi_0} V.$$
 (4.12)

Na equação 4.11, I_{tun} representa a corrente de tunelamento total, sendo $I_c \propto K$ o seu valor máximo, que ocorre quando $\varphi = \pi/2$. Essa corrente crítica pode ser medida experimentalmente e depende das características da junção (geometria, tipo de material, etc.). Observe que I_{tun} só depende da diferença de fase e existe mesmo na ausência de voltagem, como queríamos demonstrar. Se há uma diferença de potencial constante entre os supercondutores, a equação 4.12 nos revela que a fase deve variar linearmente com o tempo, implicando numa corrente alternada na junção.

Calculemos agora a energia transportada pela corrente de tunelamento. Se no instante de tempo t = 0 a junção se encontra num estado de referência $\varphi_{ref} = \pi/2$, para o qual iremos convencionar uma energia nula, e num tempo posterior t a fase evolui para φ , devido a uma diferença de potencial constante V entre o dois supercondutores, essa energia é simplesmente obtida pelo cálculo do trabalho $\int_0^t I_{tun} V dt$. Realizando essa integração, utilizando as relações 4.11 e 4.12, encontramos:

$$E_{tun} = -E_J \cos\varphi, \qquad E_J = \Phi_0 I_c / 2\pi. \tag{4.13}$$

Essa energia é conservativa, pois depende apenas da diferença de fase φ , e atinge seu valor mínimo (máximo), dado por $-E_J$ ($+E_J$), quando $\varphi = 0$ ($\varphi = \pi$).

A junção Josephson também funciona como um capacitor, já que cargas elétricas podem se acumular em ambos os lados do material isolante. Se C representa a capacitância da junção, a energia eletrostática armazenada é simplesmente $E_{ele} = CV^2/2$. Utilizando a relação 4.12, podemos escrever essa energia como:

$$E_{ele} = \frac{C\Phi_0^2}{8\pi^2} (\partial_t \varphi)^2. \tag{4.14}$$

4.2.3 CQM no SQUID

O SQUID mais simples é aquele formado por um anel supercondutor contendo uma única junção Josephson, como na figura 4.3. Este foi o primeiro dispositivo explorado teoricamente na área dos fenômenos quânticos macroscópicos com capacidade de exibir uma superposição do tipo gato de Schrödinger. Nesta seção, nosso objetivo é mostrar como a supercorrente que flui através de sua superfície pode tunelar coerentemente entre dois estados macroscopicamente distintos. A demonstração que faremos será útil para que possamos compreender o funcionamento do MQUID.



Figura 4.3: SQUID com apenas uma junção.

Com a introdução da junção Josephson no anel, é necessário alterarmos a condição de continuidade 4.5, abrindo o laço Γ e incluindo a diferença de fase φ , isto é:

$$\int_{\Gamma} \nabla \phi \cdot d\mathbf{l} + \varphi = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}$$
(4.15)

ou

$$\oint_{\Gamma} \nabla \phi \cdot d\mathbf{l} = 2\pi q, \quad q \in \mathbb{R}$$
(4.16)

onde definimos

$$q = n - \frac{\varphi}{2\pi} \tag{4.17}$$

e assumimos uma junção extremamente fina em relação ao comprimento do anel, de forma que o caminho Γ seja praticamente fechado. Observe que a expressão 4.15 é semelhante à equação 4.5, diferindo apenas por uma variável real q no lugar do número inteiro n. Assim, a nova regra de quantização do fluxo é obtida pela simples substituição de n por q na relação 4.6. Dessa forma, encontramos:

$$\Phi(q) = q \,\Phi_0. \tag{4.18}$$

Portanto, o fluxo magnético no anel supercondutor (assim como a supercorrente) tem agora a possibilidade de transitar por diferentes estados durante a sua dinâmica, graças a descontinuidade no campo de fase ϕ proporcionada pela junção Josephson.

Utilizando as relações 4.17 e 4.18, a energia magnética 4.7, a energia de tunelamento 4.13 e a energia eletrostática 4.14 podem ser escritas em função de q:

$$E_{mag} = E_0 \left(q - n_{ex} \right)^2, \tag{4.19}$$

$$E_{tun} = -E_J \cos 2\pi q, \tag{4.20}$$

$$E_{ele} = \frac{C\Phi_0^2}{2} (\partial_t q)^2.$$
 (4.21)

E a soma dessas três equações nos fornece a energia total do SQUID, que pode ser expressa como a energia mecânica de uma partícula rígida de coordenada q e massa m sob a ação de um potencial unidimensional U(q):

$$E_{SQUID} = \frac{m}{2} (\partial_t q)^2 + U(q), \qquad (4.22)$$

$$m = C\Phi_0^2, \tag{4.23}$$

$$U(q) = E_0 (q - n_{ex})^2 - E_J \cos 2\pi q.$$
(4.24)



Figura 4.4: Potencial do SQUID para $\beta > 1$. A curva azul e a verde correspondem aos valores $n_{ex} = 0$ e $n_{ex} = 1/2$, respectivamente. Observe a formação de um poço duplo quando $n_{ex} = 1/2$.



Figura 4.5: Estados degenerados de supercorrentes opostas (linhas amarelas orientadas). Na presença de um campo magnético perpendicular ao plano do SQUID (símbolo \otimes vermelho), que produz um fluxo externo $n_{ex} = 1/2$, a supercorrente deve se encontrar circulando no sentido anti-horário (figura da esquerda) ou horário (figura da direita), de modo que o fluxo total aprisionado mantenha-se no setor topológico n = 0 ou n = 1, respectivamente. Devido a presença da junção Josephson, existe uma barreira finita separando esses setores topologicamente distintos e degenerados, o que possibilita a manifestação do fenômeno da CQM.

Seja o parâmetro definido por

$$\beta = 2\pi^2 \frac{E_J}{E_0} \tag{4.25}$$

uma medida da razão entre a energia de tunelamento Josephson máxima E_J e a energia do fluxon E_0 . Se $\beta < 1$, a componente parabólica do potencial 4.24 (1° termo) prevalece sobre a parte oscilante (2° termo) sem que nenhuma barreira de energia apareça, havendo apenas um mínimo absoluto em $q = n_{ex}$. Por outro lado, se $\beta > 1$, barreiras de energias provenientes do termo oscilante surgem (veja a figura 4.4) e, para o caso particular $n_{ex} = 1/2$, os mínimos de energia correspondentes aos estados com n = 0 e n = 1 tornam-se degenerados, ou seja, há a formação de um poço duplo de potencial entre diferentes estados de fluxo. Neste caso, o fluxo externo é semi-inteiro ($\Phi_{ex} = \Phi_0/2$) e a supercorrente tem a possibilidade de fluir em sentidos opostos, como na figura 4.5, a fim de manter o sistema nos setores de fluxo n = 0 ou n = 1.

A barreira de energia entre os dois poços simétricos de potencial formados na situação $n_{ex} = 1/2$ diminui à medida que o parâmetro β se aproxima de 1. No limite de pequenas barreiras ($\beta \simeq 1$), expandimos o potencial 4.24 em torno do ponto de máximo $q_m = 1/2$ até a quarta ordem em q e encontramos um potencial efetivo quártico com uma barreira de altura e largura dadas por

$$h = \frac{3}{4\pi^2} E_0 \rho^2, \qquad w = \frac{\sqrt{6}}{\pi} \rho^{\frac{1}{2}}, \qquad \rho = 1 - \beta^{-1}.$$
 (4.26)

Utilizando essas relações, juntamente com a expressão da massa 4.23, aplicamos o método de instantons e chegamos na seguinte taxa de tunelamento coerente:

$$\Delta = \omega \sqrt{\frac{24S_1}{\pi}} e^{-S_1} \tag{4.27}$$

com

$$\omega = \sqrt{\frac{32h}{mw^2}} = \sqrt{\frac{4E_0\rho}{m}} = \sqrt{\frac{2\rho}{\mathcal{L}C}}$$
(4.28)

e

$$S_1 = \frac{16h}{3\omega} = \frac{2}{\pi^2} \sqrt{E_0 m \rho^3} = \frac{\Phi_0^2}{\pi^2} \sqrt{2\rho^3 \frac{C}{\mathcal{L}}},$$
(4.29)

e uma temperatura de crossover dada por

$$k_B T_c = \frac{3}{16} \omega = \frac{3}{16} \sqrt{\frac{2\rho}{\mathcal{L}C}}.$$
 (4.30)

Observe que a taxa de tunelamento Δ é função da capacitância C da junção e da auto-indutância \mathcal{L} do anel supercondutor, os quais dependem de fatores geométricos. Porém, note que C é o único parâmetro que ao ser variado é capaz de aumentar a frequência ω e ao mesmo tempo diminuir a ação do instanton S_1 , de maneira a ampliar Δ . Em outras palavras, o fenômeno da CQM no SQUID depende mais da geometria da junção do que da geometria do anel. Experimentalmente, é possível trabalhar com capacitâncias extremamente pequenas que permitem a detecção de CQM em SQUIDs de raios micrométricos.

Evidências convincentes de uma superposição de dois estados macroscópicos de supercorrente foram obtidas a partir do ano 2000 com os experimentos realizados por Friedman e colaboradores [11]. Eles utilizaram um SQUID um pouco mais sofisticado do que o apresentado acima. A diferença está na substituição da junção Josephson por um anel contendo duas junções. Esse novo arranjo permite que a altura h da barreira seja controlada por um campo magnético externo aplicado no interior do anel adicional. Eles utilizaram também outro SQUID capaz de sondar o valor do fluxo no interior do sistema de interesse. Com radiações de microondas, o sistema foi excitado para os dois níveis mais energéticos abaixo da barreira de potencial, e o espectro de energia desses níveis foram investigados para vários valores de h e de assimetria dos poços ($\epsilon \sim n_{ex} - 1/2$). No ponto de degenerescência, eles detectaram uma superposição quântica de dois estados envolvendo cerca de 10^9 pares de Cooper, com esses dois estados separados por uma quantia de $\Phi_0/4$ em fluxo, $1 \mu A$ em corrente, e $10^{10}\mu_B$ em momento magnético.

No mesmo ano dos experimentos de Friedman, a equipe de van der Wal observou a repulsão entre os dois níveis mais baixos de energia, porém, trabalhando com um SQUID bem menor e contendo três junções [12]. Em 2003, também foi detectada oscilações de Rabi entre os dois primeiros estados [13] e, recentemente, observou-se uma violação da desigualdade de Leggett e Garg [15]. Todos esses resultados experimentais e muito outros demonstram claramente a existência de superposições de estados macroscopicamente distintos, como previsto por Leggett trinta anos atrás.

4.3 Resultados e discussão

4.3.1 Anel ferromagnético

Com o intuito de buscarmos um simples sistema magnético similar ao SQUID, consideremos um anel ferromagnético quase-1D (figura 4.6) descrito no limite contínuo pelo seguinte funcional de energia:

$$E[\mathbf{n}] = A \oint dz \left\{ J \left(\partial_z \mathbf{n}\right)^2 + K_z n_z^2 - D \left(\mathbf{n} \times \partial_z \mathbf{n}\right)_z \right\},$$
(4.31)

onde $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ representa o campo vetorial unitário de magnetização, A a área da seção reta transversal, J a energia de troca, K_z a anisotropia de plano-fácil e D a denominada interação de Dzyaloshinskii-Morya [77]. Esta última origina-se do acoplamento spin-órbita e é efetivamente modelada por um termo de troca anisotrópico entre spins vizinhos da forma $-\mathbf{D} \cdot \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{s}}_i \times \hat{\mathbf{s}}_j$, onde \mathbf{D} é conhecido como o vetor de Dzyaloshinskii-Morya. Na energia 4.31, assumimos que este vetor é perpendicular ao plano-fácil, isto é, $\mathbf{D} = D\hat{z}$.



Figura 4.6: Anel ferromagnético descrito pelo funcional de energia 4.31.

No limite XY $(K_z \gg D/a)$, a componente z do campo de magnetização é muito pequena $(n_z \ll 1)$ e o ferromagneto é descrito por um modelo efetivo depende apenas do campo $\phi = \arctan(n_y/n_x)$, cujo funcional de energia e a equação de movimento são dadas pelas respectivas expressões:

$$E[\phi] = A \oint dz \left\{ \frac{J}{c^2} (\partial_t \phi)^2 + J \left(\partial_z \phi - \frac{D}{2J} \right)^2 \right\}$$
(4.32)

e

$$\frac{1}{c^2}\partial_t^2\phi - \partial_x^2\phi = 0.$$
(4.33)

No caso da supercondutividade, vimos que o parâmetro de ordem é um vetor no plano complexo $\psi = \sqrt{n_s} (\cos \phi + i \sin \phi)$ determinado pela fase ϕ e pela densidade de pares de Cooper n_s . Para um ferromagneto com simetria XY, temos um parâmetro de ordem similar, definido pela projeção do vetor de magnetização n sobre o plano xy, isto é:

$$\mathbf{n}_{xy} = \sqrt{1 - n_z^2} \left(\hat{x} \cos \phi + \hat{y} \sin \phi \right), \tag{4.34}$$

que é um vetor real determinado pelas variáveis canonicamente conjugadas ϕ e $n_z \ll$ 1. Por meio da equação que rege a dinâmica da "densidade de carga" n_z , dada por

$$\frac{1}{\gamma}\partial_t n_z = \delta_{\phi} \mathcal{E} = \partial_{\phi} \mathcal{E} - \nabla \cdot (\partial_{\nabla \phi} \mathcal{E}), \qquad (4.35)$$

onde definimos a densidade de energia

$$\mathcal{E} = \frac{J}{c^2} (\partial_t \phi)^2 + J \left(\partial_z \phi - \frac{D}{2J} \right)^2, \tag{4.36}$$

encontramos uma equação de continuidade

$$\partial_t n_z + \nabla \cdot \mathbf{j}_s = 0 \tag{4.37}$$

contendo uma "densidade de supercorrente"

$$\mathbf{j}_s = 2\gamma J A \left(\nabla \phi - \frac{\mathbf{D}}{2J} \right) \tag{4.38}$$

similar àquela encontrada para um supercondutor (equação 4.2), com $\nabla \phi = \partial_z \phi \hat{z}$, e $\mathbf{D} = D\hat{z}$ fazendo o papel do potencial vetor.

Assim como ocorre no anel supercondutor, a energia associada com a supercorrente

 j_s que flui ao longo do anel ferromagnético deve ser quantizada. Este efeito é uma consequência do limite contínuo e da condição de contorno periódica. Essas condições impõem que o número de giros que o parâmetro de ordem n_{xy} realiza sobre o plano xy ao longo da circunferência do anel seja um número inteiro, isto é:

$$\oint \partial_z \phi \, dz = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}$$
(4.39)

onde n é a carga topológica (o número de giros).

As configurações estáticas do campo ϕ que minimizam o funcional de energia 4.32 são obtidas assumindo $\phi = \phi(z)$ na equação de movimento 4.33. Dessa maneira, chegamos em $\partial_z^2 \phi = 0$ e, levando em conta a condição de contorno 4.39, encontramos:

$$\phi_n(z) = \frac{2\pi n}{L} z + \phi_0, \tag{4.40}$$

com *L* representando a circunferência do anel e $\phi_0 \in \mathbb{R}$ sendo um ângulo que descreve a invariância do funcional de energia 4.32 sob rotações globais contínuas do campo \mathbf{n}_{xy} . A figura 4.7 ilustra o comportamento da solução 4.40 para alguns valores de *n*.



Figura 4.7: Exemplos de configurações estáticas que minimizam o funcional de energia 4.32, onde n = 0, 1 e 2 representam suas cargas topológicas (vorticidade).

As estruturas espiraladas da figura 4.7 são vórtices unidimensionais e se assemelham aos fluxons aprisionados no anel supercondutor. De fato, se substituirmos a solução 4.40 em 4.32, obtemos uma expressão matematicamente igual à da energia magnética 4.7:

$$E_{mag} = E_0 (n - n_D)^2, \qquad E_0 = 4\pi^2 J A / L, \qquad n_D = D L / 4\pi J,$$
 (4.41)

onde E_0 representa agora a energia de um único vórtice e n_D é um parâmetro que

entra no lugar de n_{ex} , existindo por causa da presença da interação de Dzyaloshinskii-Morya no modelo.

4.3.2 Junção ferromagnética

Para simularmos a energia de tunelamento Josephson (equação 4.13), assumiremos que num pequeno pedaço do anel, muito menor que L, a energia de troca JA seja reduzida para um valor extremamente pequeno J'A' de modo a quebrar a condição de continuidade nessa região (veja a figura 4.8). Neste caso, devemos abrir a integral fechada no hamiltoniano 4.32, isto é, $\oint \rightarrow \int_{-L/2}^{L/2}$, e adicionar a energia de troca $E_{tun} =$ $-J'A' \mathbf{n}(-L/2) \cdot \mathbf{n}(L/2)$ entre os pontos fracamente ligados, $\pm L/2$. Impondo o limite XY, $n_z(\pm L/2) \ll 1$, essa energia pode ser escrita como

$$E_{tun} = -E_J \cos \varphi, \qquad E_J = J'A', \qquad \varphi = \phi(L/2) - \phi(-L/2),$$
(4.42)

que atinge seus valores mínimo (- E_J) e máximo (E_J) quando os vetores de magnetização n(-L/2) e n(L/2) são paralelos ($\varphi = 0$) e antiparalelos ($\varphi = \pi$), respectivamente.



Figura 4.8: (a) Junção ferromagnética obtida por meio de uma redução da energia de troca JA para uma pequena quantia J'A' num pequeno pedaço do anel ferromagnético. (b) Neste caso, a condição de continuidade é quebrada e o campo de magnetização no centro da junção deve apresentar uma "diferença de fase" $\varphi = \phi(L/2) - \phi(-L/2)$ capaz de assumir qualquer valor real.

Vimos que a junção Josephson funciona como um capacitor e armazena uma energia eletrostática $E_{ele} \propto (\partial_t \varphi)^2$ (equação 4.14). No caso da junção ferromagnética, essa energia deve surgir do termo cinético do hamiltoniano 4.32, dado por

$$E_{ele}[\phi] = \frac{JA}{c^2} \int_{-L/2}^{L/2} dz \, (\partial_t \phi)^2.$$
(4.43)

4.3.3 CQM no MQUID

Consideremos agora o MQUID, isto é, um dispositivo análogo ao SQUID formado por um anel ferromagnético fechado por uma fraca ligação de troca (figura 4.9). Assim como ocorre no SQUID, a presença da junção no anel altera a condição de continuidade 4.39 para

$$\oint \partial_z \phi \, dz = 2\pi q, \quad q \in \mathbb{R}$$
(4.44)

 com

$$q = n - \frac{\varphi}{2\pi}.\tag{4.45}$$



MOUID

Graças a descontinuidade proporcionada pela junção, durante a dinâmica o campo de magnetização pode agora passar por configurações com cargas topológicas fracionárias, como as apresentadas na figura 4.10. Ou seja, a junção abre possibilidades de ocorrência de tunelamento quântico da magnetização entre setores topologicamente distintos.



Figura 4.10: Exemplos de configurações magnéticas do MQUID com cargas topológicas fracionárias q = 1/2, 3/2 e 5/2.

Assumindo que ao longo da dinâmica a densidade de supercorrente 4.38 permaneça homogênea, ou seja, que o gradiente $\partial_z \phi$ seja uma constante, e que os vetores de magnetização fracamente ligados, n(-L/2) e n(+L/2), girem no plano xy com velocidades iguais e em sentidos opostos, a condição de contorno 4.44 nos leva a uma solução

$$\phi(z,t) = \frac{2\pi q(t)}{L} z + \phi_0, \qquad z \in [-L/2, +L/2]$$
(4.46)

semelhante à solução 4.40, diferindo apenas pela substituição da carga topológica n pela variável dinâmica q. Para esse ansatz, encontramos:

$$E_{mag} = E_0 (q - n_D)^2,$$
 (4.47)

$$E_{tun} = -E_J \cos 2\pi q, \tag{4.48}$$

$$E_{ele} = \frac{\pi^2}{12\gamma^2} \frac{V}{K_z} (\partial_t q)^2,$$
 (4.49)

onde V = AL é o volume do anel.

A soma das três equações acima nos conduz à energia total do MQUID, que pode ser expressa como a energia mecânica de uma partícula rígida de coordenada q e massa m sob a ação de um potencial unidimensional U(q) matematicamente igual ao do SQUID:

$$E_{MQUID} = \frac{m}{2} \left(\partial_t q\right)^2 + U(q), \qquad (4.50)$$

$$m = \frac{\pi^2}{6\gamma^2} \frac{V}{K_z},\tag{4.51}$$

$$U(q) = E_0 (q - n_D)^2 - E_J \cos 2\pi q.$$
(4.52)

Quando $\beta = 2\pi^2 E_J/E_0 > 1$ ($\rho = 1 - \beta^{-1} > 0$) e $n_D = 1/2$, os estados de magnetização com cargas topológicas n = 0 e n = 1 tornam-se degenerados e separados por uma barreira de energia finita localizada em q = 1/2 (veja a figura 4.11). Neste caso, um tunelamento quântico coerente pode ocorrer. No limite de pequenas barreiras ($\rho \simeq 0$), podemos utilizar as equações desenvolvidas para o SQUID. Dessa maneira, encontramos uma taxa de tunelamento

$$\Delta = \omega \sqrt{\frac{24S_1}{\pi}} e^{-S_1} \tag{4.53}$$

com

$$\omega = \sqrt{\frac{4E_0\rho}{m}} = \frac{4\gamma}{L}\sqrt{6\rho J K_z} = \frac{2c}{L}\sqrt{6\rho}$$
(4.54)

e

$$S_1 = \frac{2}{\pi^2} \sqrt{E_0 m \rho^3} = \frac{2A}{\gamma} \sqrt{\frac{2J\rho^3}{3K_z}},$$
(4.55)

e uma temperatura de crossover

$$k_B T_c = \frac{3}{16}\omega = \frac{3c}{8L}\sqrt{6\rho}.$$
 (4.56)

Observe que um aumento do parâmetro de anisotropia planar K_z acarreta num aumento da frequência ω e numa diminuição da ação do instanton S_1 e, consequentemente, numa ampliação da taxa de tunelamento Δ , assim como ocorre na CQM de um domínio magnético e na CQM de uma parede de domínio. Entretanto, o MQUID tem a capacidade de manifestar um tunelamento coerente bem mais macroscópico em relação a esses outros sistemas ferromagnéticos, uma vez que Δ decresce exponencialmente com o aumento da área A e não com o aumento do volume V = AL.



Figura 4.11: Ilustração do fenômeno da CQM entre os estados de magnetização n = 0 e n = 1 (configurações azuis) que ocorre quando $n_D = 1/2$. O estado com carga topológica fracionária q = 1/2 (configuração vermelha) representa a altura da barreira de energia que separa os setores topológicos n = 0 e n = 1.

4.4 Conclusão

Neste capítulo, discutimos sobre a física envolvida no SQUID mais simples, isto é, aquele formado por um anel supercondutor contendo uma única junção Josephson. Vimos que a energia da supercorrente que flui sobre o SQUID deve ser quantizada, como consequência do fenômeno da quantização do fluxo, e que a presença da junção Josephson permite efeitos de tunelamento com essa supercorrente. Mostramos que um campo magnético externo é capaz de induzir um tunelamento quântico coerente entre dois estados degenerados de supercorrentes que fluem em sentidos opostos e que a taxa de tunelamento correspondente depende principalmente do valor da capacitância efetiva da junção.

Em seguida, sugerimos um MQUID, isto é, um anel ferromagnético contendo uma junção formada por uma fraca ligação de troca. Utilizando um modelo de Heisenberg quase-1D contendo uma anisotropia de plano-fácil e uma interação de Dzyaloshinskii-Morya, mostramos que a "supercorrente" no MQUID é formada por vórtices magnéticos e que, dependendo da intensidade da interação de Dzyaloshinskii-Morya, essa supercorrente pode exibir tunelamento coerente entre estados com números de vórtices distintos. No caso de uma biestabilidade entre os estados com vorticidades n = 0e n = 1, que ocorre quando $n_D = 1/2$, vimos que a taxa de tunelamento decresce exponencialmente com a área da seção reta transversal. Por causa dessa propriedade, concluímos que o MQUID deve exibir CQM em proporções bem maiores em comparação com os demais sistemas ferromagnéticos investigados até o momento, para os quais a taxa de tunelamento decai exponencialmente com o volume do sistema.

Capítulo 5

Conclusão

This most beautiful system - The Universe - could only proceed from the dominion of an intelligent and powerful Being (Isaac Newton).



N^{ESTA} tese, sugerimos dois dispositivos ferromagnéticos que podem exibir o fenômeno da CQM. Para descrevê-los, utilizamos modelos de Heisenberg anisotrópicos, trabalhando na base de estados coerentes de spin, na aproximação do contínuo e no limite de forte anisotropia de plano-fácil. As taxas de tunelamento obtidas são válidas dentro da aproximação do gás diluído de instantons e no limite de pequenas barreiras de potencial.

O primeiro dispositivo que propusemos é um fio quase-1D cujo hamiltoniano apresenta anisotropias de plano-fácil e eixo-fácil. Vimos que esse sistema suporta paredes de domínio que se comportam como partículas massivas carregadas magneticamente. Mostramos que um defeito no fio (buraco, impureza não magnética, etc.) ou um campo magnético externo local podem aprisionar uma parede de domínio e induzi-la a uma oscilação com níveis de energia quantizados. Aproximando o potencial de aprisionamento como o de um oscilador harmônico simples, e utilizando valores típicos para um fio de YIG, encontramos uma frequência de oscilação de 0,1 GHz para um parede composta por 10⁴ spins, que está bem abaixo da frequência de ativação dos mágnons (1 GHz). No caso de uma parede na presença de dois centros de aprisionamento idênticos, mostramos que pequenas barreiras de potencial entre dois estados degenerados de posição da parede podem surgir quando a separação entre os centros de aprisionamento é maior e da ordem da largura da parede. Utilizando novamente valores de parâmetros de um fio de YIG, encontramos uma taxa de tunelamento de 1 MHz e uma temperatura de crossover de 1 mK para uma parede contendo 10⁴ spins. Esses valores estão dentro do alcance experimental e acreditamos que técnicas de espectroscopia possam verificar esses fenômenos.

O segundo sistema que apresentamos é o MQUID, o qual é formado por um anel quase-1D descrito por um hamiltoniano contendo uma anisotropia de plano-fácil e uma interação de Dzyaloshinskii-Morya. Em um pequeno pedaço do anel, há uma junção (fraca ligação de troca) que permite o tunelamento do campo de magnetização entre estados com números de vórtices distintos. Assumindo um simples ansatz para o comportamento temporal do campo de magnetização, encontramos um hamiltoniano equivalente ao do SQUID e calculamos a taxa de tunelamento entre os estados com vorticidades n = 0 (magnetização total máxima) e n = 1 (magnetização total nula), os quais se tornam degenerados para uma certa intensidade da interação de Dzyaloshinskii-Morya ($n_D = 1/2$). Observamos que a taxa de tunelamento decai exponencialmente com a área da seção reta transversal do fio e, por causa dessa propriedade, esperamos que o MQUID possa exibir CQM em escalas bem maiores em relação aos outros sistemas ferromagnéticos até então explorados. É importante encontrarmos valores de parâmetros de algum material que se enquadre em nosso modelo de MQUID, para que possamos obter estimativas reais do número de spins que poderiam participam desse tipo de tunelamento coerente. Gostaríamos de encontrar também algum mecanismo externo capaz de substituir a interação de Dzyaloshinskii-Morya, de maneira a permitir um controle externo do grau de assimetria entre os poços de potencial.

Em geral, efeitos quânticos macroscópicos em sistemas ferromagnéticos podem ser destruídos por causa das interações do campo de magnetização com outros graus de liberdade, tais como elétrons, fótons e fônons. No caso de uma parede de domínio com largura macroscópica, estudos revelam que esses acoplamentos podem ser negligenciados em temperaturas suficientemente baixas [57, 58]. Seria interessante também investigarmos os efeitos dessas interações sobre o tunelamento da magnetização no MQUID, incluindo as interações com os mágnons, já que no hamiltoniano do MQUID a anisotropia de eixo-fácil é nula e, então, não há gap de anisotropia. Esses estudos são geralmente realizados por meio do modelo Caldeira-Leggett [44, 45, 46].

Ressaltamos que os resultados apresentados nesta tese podem ser extrapolados para diferentes sistemas físicos. De fato, sólitons e vórtices aparecem não só em ferromagnetos quase-1D, mas também em superfícies ferromagnéticas bidimensionais planas [78], cônicas [79], em nanatubos cilíndricos [80], fitas de Möbius [81], entre outras geometrias. Além de sistemas ferromagnéticos, essas excitações podem surgir também em antiferromagnetos, supercondutores, superfluidos, etc.

CAPÍTULO 5. CONCLUSÃO

Referências Bibliográficas

- R. Eisberg e R. Resnick, Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas (Editora Campus, 1979).
- [2] W. Heisenberg, Zeitschrift für Physik 33, 879 (1925).
- [3] E. Schrödinger, Annalen der Physik 79, 361 (1926).
- [4] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, (Oxford: Clarendon Press, 1930).
- [5] J. von Neumann, Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik
 (Springer, 1932). Tradução em inglês: Mathematical Foundations of Quantum Mechanics (Princeton University Press, 1955).
- [6] E. Schrödinger, Naturwissenschaften 23, 823 (1935).
- [7] A. J. Leggett, Prog. Theor. Phys. Suppl. 69, 80 (1980).
- [8] A. J. Leggett, J. Phys.: Condens. Matter 14, R415 (2002).
- [9] R. Rouse et al. Phys. Rev. Lett. 75, 1614 (1995).
- [10] P. Silvestrini et al. Phys. Rev. B 54, 1246 (1996).
- [11] J. R. Friedman et al. Nature 406, 43 (2000).
- [12] C. H. van der Wal et al. Science 290, 773 (2000).
- [13] I. Chiorescu et al. Science 21, 1869 (2003).
- [14] E. Il'ichev et al. Phys. Rev. Lett. 91, 097906 (2003).

- [15] A. Palacios-Laloy et al. Nature Phys. 6, 442 (2010).
- [16] J. E. Mooij, Nature Phys. 6, 401 (2010).
- [17] A. J. Leggett and A. Garg, Phys. Rev. Lett. 54, 857 (1985).
- [18] Y. Makhlin et al. Rev. Mod. Phys. 73, 357 (2001).
- [19] J. Clarke and F. K. Wilhelm, Nature 453 (2008).
- [20] Nakamura et al. Nature 398, 786 (1999).
- [21] M. Arndt et al. Nature **401**, 680 (1999).
- [22] S. Gerlich et al. Nature comm. 2, 1 (2011).
- [23] M. R. Andrews et al. Science 273, 84 (1996).
- [24] B. Julsgaard et al. Nature 413, 400 (2001).
- [25] A. D. O'Connell et al. Nature 464, 697 (2010).
- [26] A. Cho, Science **330**, 1604 (2010).
- [27] E. M. Chudnovsky and L. Gunther. Phys. Rev. Lett. 46, 60 (1988).
- [28] P. C. E. Stamp et al. Int. Journal of Mod. Phys. B 258, 1355 (1992).
- [29] J. R. Friedman and M. P. Sarachik, Ann. Rev. Cond. Matt. Phys. 1, 109 (2010).
- [30] A. O. Caldeira and K. Furuya, J. Phys. C: Solid State Phys. 21, 1227 (1988).
- [31] E. M. Chudnovsky and L. Gunther, Phys. Rev. B 37, 9455 (1988).
- [32] E. M. Chudnovsky and J. Tejada, Macroscopic Quantum Tunneling of the Magnetic Moment (Cambridge University Press, 1998).
- [33] J. R. Friedman and Siyuan Han, Exploring the Quantum/Classical Frontier -Recent Advances in Macroscopic Quantum Phenomena (Nova Science Publishers, 2003).

- [34] E. G. Galkina et al. Phys. Rev. B 77, 134425 (2008).
- [35] K. Hong and N. Giordano, J. Magn. Magn. Mater. 151, 396 (1995); J.
 Phys.: Cond. Matt. 8, L301 (1996).
- [36] D. D. Awschalom et al. Science 258, 414 (1992).
- [37] F. Luis et al. Phys. Rev. Lett. 85, 4377 (2000).
- [38] R. P. Feynman, R. B. Leighton and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics* V3 (Addison Wesley, 1964).
- [39] S. Coleman, Phys. Rev. D 15, 2929 (1977).
- [40] C. G. Callan and S. Coleman, Phys. Rev. D 16, 1762 (1977).
- [41] G. 'tHooft, Phys. Rev. Lett. 37, 8 (1976).
- [42] R. Rajaraman, Solitons and Instantons (North-Holland, 1987).
- [43] S. Takagi, *Macroscopic quantum tunneling* (Cambridge University Press, 2002).
- [44] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. 46, 211 (1981).
- [45] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Ann. Phys. 149, 374. (1983).
- [46] A. J. Leggett et al. Rev. Mod. Phys. 59, 1 (1987).
- [47] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, Computação Quântica e Informação Quântica (Bookman companhia, 2005).
- [48] A. J. Leggett and A. Garg. Phys. Rev. Lett. 54, 857 (1985).
- [49] A. Altland and B. Simons, Condensed Matter Field Theory (Cambridge University Press, 2006).
- [50] U. Weiss, Quantum Dissipative Systems (World Scientific, 1993).
- [51] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics (Addson-Wesley, 1994).

- [52] E. Fradkin, Field Theories of Condensed Matter Physics (Addison-Wesley, 1991).
- [53] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, 1976).
- [54] R. M. White, Quantum Theory of Magnetism (Springer, 2007).
- [55] H. B. Braun and D. Loss, Phys. Rev. B 53, 3237 (1996).
- [56] H. B. Braun et al. Phys. Rev. B 56, 8129 (1997).
- [57] P. C. E. Stamp, Phys. Rev. Lett. 66, 2802 (1991).
- [58] E. M. Chudnovsky et al. Phys. Rev. B 46, 5392 (1992).
- [59] G. H. Kim, Phys. Rev. B 58, 12138 (1998).
- [60] F. Gaitan, Phys. B 194, 265 (1994); J. Phys.: Cond. Matt. 6, 7565 (1994).
- [61] H. B. Braun et al. J. Appl. Phys. 76, 10 (1994).
- [62] S. Takagi and G. Tatara, Phys. Rev. B 59, 5420 (1996).
- [63] J. A. Freire, Phys. Rev. B 65, 104436 (2002).
- [64] C. Paulsen et al. Phys. Lett. A 161, 319 (1991); C. Paulsen, et al. Europhys. Lett. 19, 643 (1992).
- [65] D. Goodstein and J. Goodstein, Phys. perspect. 2, 30 (2000).
- [66] S. L. Thomasson and C. M. Gould, J. Low Temp. Phys. 101, 243 (1995).
- [67] R. C. Black et al. Appl. Phys. Lett. 62, 2128 (1993).
- [68] D. Cohen, Science 175, 664 (1972).
- [69] P. D. Nation et al. Phys. Rev. Lett. 103, 087004 (2009).
- [70] J. R. Johansson et al. Phys. Rev. Lett. 103, 147003 (2009).
- [71] H. K. Onnes, Akad. van Wetenschappen 14, 818 (1911).

- [72] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [73] G. L. Ginzburg and L. D. Landau, Zh. Eksperim. Teor. Fiz. 20, 1064 (1950).
- [74] B. D. Josephson, Rev. Mod. Phys. 46, 251 (1974).
- [75] P.W. Anderson and J. M. Rowell, Phys. Rev. Lett. 10, 230 (1963).
- [76] A. Zagoskin and A. Blais, Phys. Canada 63, 215 (2007).
- [77] T. Morya, Phys. Rev. 120, 91 (1960).
- [78] F. M. Paula, A. R. Pereira and L.A.S. Mól, Phys. Lett. A 329, 155 (2004).
- [79] W. A. Freitas, W. A. M. Melo, A.R. Pereira, Phys. Lett. A 336, 412 (2005).
- [80] P. Landeros et al. Phys. Rev. B 79, 024404 (2009).
- [81] M. Yoneya, K. Kuboki and M. Hayashi, Phys. Rev. B 78, 064419 (2008).