

ALLISON WAGNER TEIXEIRA

ESTUDO DE PROPRIEDADES DE SISTEMAS COM ORDEM
TOPOLÓGICA

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa,
como parte das exigências do Programa de Pós-
Graduação em Física Aplicada, para obtenção de
título de *Doctor Scientiae*.

Orientador: Jakson Miranda Fonseca

Coorientador: Vagson Luiz de Carvalho Santos

VIÇOSA - MINAS GERAIS
2020

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

T266e
2020
Teixeira, Allison Wagner, 1991-
Estudo de propriedades de sistemas com ordem topológica /
Allison Wagner Teixeira. – Viçosa, MG, 2020.
119 f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Inclui apêndices.

Orientador: Jakson Miranda Fonseca.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 112-119.

1. Topologia. 2. Supercondutividade. 3. Magnetismo.
I. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Física.
Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada. II. Título.

CDD 22. ed. 537.623

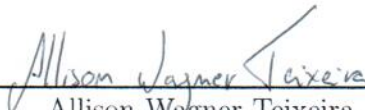
ALLISON WAGNER TEIXEIRA

ESTUDO DE PROPRIEDADES DE SISTEMAS COM ORDEM
TOPOLÓGICA

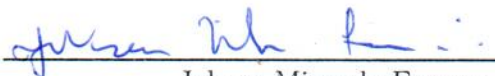
Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa,
como parte das exigências do Programa de Pós-
Graduação em Física Aplicada, para obtenção de
título de *Doctor Scientiae*.

APROVADA: 26 de novembro de 2020.

Assentimento:



Allison Wagner Teixeira
Autor



Jakson Miranda Fonseca
Orientador

À Jheneffer e ao melhor
companheiro, Toth.

Agradecimentos

À Jheneffer, por ter estado ao meu lado em todos os momentos da minha formação;

Ao Toth, o melhor companheiro, sempre;

Ao meu orientador, Jakson, e ao coorientador, Vagson, por todo o trabalho realizado e ensinamentos;

A toda minha família, pelo apoio, incentivo e auxílio;

Aos meus amigos, e irmãos, do Zebus MC, por acreditarem na minha capacidade;

À Universidade Federal de Viçosa e ao Departamento de Física da Universidade Federal de Viçosa, pelo acolhimento e oportunidade;

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio financeiro.

Resumo

TEIXEIRA, Allison Wagner, D.Sc, Universidade Federal de Viçosa, novembro de 2020. **Estudo de Propriedades de Sistemas com Ordem Topológica**. Orientador: Jakson Miranda Fonseca. Coorientador: Vagson Luiz de Carvalho Santos.

Nesse trabalho, estudamos sistemas supercondutores e magnéticos, ambos com ordenamento topológico não trivial. Supercondutores topológicos apresentam condições para emergência de férmions de Majorana, cujo potencial efetivo foi calculado. Com tal potencial, algumas características dos sistemas foram encontradas, como número de partículas, a equação de *gap* supercondutor e as condições em que supercondutividade é induzida em isolantes topológicos por efeito de proximidade. A possibilidade de emergência de férmions de Majorana em cupratos supercondutores de alta temperatura crítica também foi estudada. Além disso, a massa de um skyrmion em uma rede de spin com topologia não trivial, em função da velocidade foi encontrada. Nesse caso, encontramos ainda uma transição de fase topológica devido ao aumento do número de skyrmions que ocorre acima de uma velocidade crítica. Por fim, determinamos estados de configurações magnéticas que minimizam a energia em uma nanocasca toroidal, que apresenta geometria com topologia não trivial. A partir do cálculo de energia de distintas configurações da magnetização pudemos construir um diagrama de estados.

Palavras-Chave: Topologia. Supercondutividade. Magnetismo.

Abstract

TEIXEIRA, Allison Wagner, D.Sc, Universidade Federal de Viçosa, November, 2020. **Study of Properties of Systems with Topological Order.** Adviser: Jakson Miranda Fonseca. Co-Adviser: Vagson Luiz de Carvalho Santos.

In this work we studied superconductor and magnetic systems that have non trivial topological order. Topological superconductors present conditions to the emergence of Majorana fermions, whose the effective potential was calculated. With this potential, some characteristics of these systems were obtained, as the particle number, superconductor gap equation and the conditions of induced superconductivity in topological insulators by proximity effect. The possibility of emergency of Majorana fermions in High- T_c cuprates was studied as well. Besides, the mass of a skyrmion in a spin lattice with non-trivial topology, as a function of the velocity, was obtained. In this case, we found a topological phase transition due the increase of the number of skyrmions that occur above a critical velocity. Finally, we studied states of magnetic configurations that minimizes the energy of a toroidal nanoshell, which geometry has non trivial topology. From the calculus of the energies for distinct magnetization configurations we obtained a diagram of states.

Keywords: Topology. Superconductivity. Magnetism.

Lista de Figuras

1.1	Uma caneca pode ser deformada suave e continuamente em um toro, que são topologicamente equivalentes. Ambas são formas geométricas de $genus = 1$	16
1.2	Isolante topológico 3D coberto com uma camada de filme supercondutor. São esperados modos zero de Majorana ligados ao vórtice dado por um parâmetro supercondutor de onda p	18
1.3	Representação de um skyrmion em uma rede de spins hexagonal.	21
1.4	(a) Representação de um skyrmion de Bloch e (b) representação de um skyrmion de Néel.	22
1.5	Representação de uma configuração magnética na superfície de uma nanocasca toroidal correspondente a um vórtice toroidal.	23
2.1	(a) Cadeia para $\Delta = t = 0$, em que férmions de Majorana de mesmo sítio são acoplados. (b) Cadeia para $\Delta = t$ e $\mu = 0$, em que vizinhos são acoplados, restando dois férmions espacialmente separados e em modo zero de energia nas extremidades.	30
2.2	Transição de fases do estado trivial para o estado topológico para a cadeia de Kitaev. A região verde representa a fase topológica, que ocorre quando $ \mu < 2t $. A linha vermelha, que representa $\mu = \pm 2t$, mostra quando o gap se fecha, separando o estado trivial do estado topológico.	33
2.3	Δ' em função de T'	39

2.4	Densidade de número de partículas no espaço dos momentos em função de p para $\Delta = 1$, e diferentes valores de μ e t	41
3.1	(a) IT bidimensional com supercondutividade induzida por efeito de proximidade. A presença dos materiais ferromagnéticos proporciona condições para a emergência de férmions de Majorana. (b) Relação de dispersão para o estado de borda. As linhas vermelha e amarela representam os estados para o IT. A presença do campo magnético abre um <i>gap</i> , representado pelas curvas pretas.	44
3.2	$ \tilde{\Delta} $ em função da temperatura, para $\Lambda = 1$	57
4.1	Estruturas cristalinas para os cupratos (a) $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ e (b) $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$	59
5.1	Representação da rede de spin hexagonal considerada. O <i>inset</i> mostra um sítio particular da rede, classificado pelos índices i, j , com seus primeiros vizinhos, circulado em verde.	73
5.2	(a) Configuração inicial de S_z para um skyrmion com velocidade nula. O skyrmion obtido é estável no centro. (b) Campo vetorial no plano, para S_x e S_y do skyrmion inicial, relativo à Fig. 5.2(a).	77
5.3	(a) skyrmion quase sem deformação para a constante $\mathbf{v}' = 0.005$, que corresponde a uma baixa velocidade de $\mathbf{v} = 1.5\text{m/s}$. (b) auto-campo gerado para o skyrmion da Fig. 5.3(a). O campo é pequeno o suficiente, em relação à outras grandezas competidoras, para gerar o skyrmion quase sem deformação da Fig. 5.3(a).	78
5.4	(a) skyrmion deformado para a constante $\mathbf{v}' = 0.3$, respectiva a uma velocidade de $\mathbf{v} = 91.3\text{m/s}$. (b) auto-campo gerado para o skyrmion da Fig. 5.3(a). Para essa velocidade, o campo é suficientemente grande, em relação às demais grandezas competidoras, para deformar o skyrmion.	79

5.5	Relação de D_{xx} e D_{yy} em função de \mathbf{v}' . D_{xx} e D_{yy} estão diretamente relacionados às massas \mathcal{M}_{xx} e \mathcal{M}_{yy} , respectivamente. A curva representada, então, também representa o comportamento da massa do skyrmion, a menos de uma constante.	80
5.6	Energia Dzyaloshinskii-Moriya em função de \mathbf{v}' . O módulo da energia aumenta com o aumento da velocidade, o que ocorre devido à deformação do skyrmion.	81
5.7	(a) Componente S_z dos skyrmions na rede para $\mathbf{v}' = 0.6$. A velocidade de transição está entre $0.5 > \mathbf{v}' \geq 0.6$. (b) Campo vetorial dos skyrmions deformados para a constante $\mathbf{v}' = 0.6$	82
5.8	Rede com 30 sítios por aresta e $\mathbf{v}' = 0.8$. Há o aumento do número de skyrmions em quantidade tanto quando a rede permite. Os skyrmions da rede se mantêm deformados enquanto houver velocidade não nula.	83
6.1	Geometria toroidal e parâmetros que descrevem uma casca toroidal. R e r são os raios externos e internos, respectivamente, e φ e θ ($\in [0, 2\pi)$) são os ângulos azimutal e polar, respectivamente.	85
6.2	Três configurações representando estados na superfície. Figuras a, b e c representam respectivamente um vórtice toroidal ($\alpha = \pi/2$), um vórtice poloidal ($\alpha = 0$) e um estado tipo-tokamak com $\alpha = \pi/4$	87
6.3	A Figura mostra o gráfico de densidade da energia de troca de um estado na superfície em função de α e p . Cores escuras representam menores valores de energia.	88
6.4	Energia total dos estados VT (azul) e VP (vermelho) para $R = 200$ nm em função de r	89
6.5	Energia magnética dos estados magnéticos considerados. Aqui, apresentamos as energias para $r/R = 0.50$ (a), $r/R = 0.70$ (b), $r/R = 0.90$ (c) e $r/R = 0.95$ (d).	90

6.6	Fig. (a) mostra o campo de magnetização obtido através de simulações micromagnéticas para um nanotoro com $R = 100$ nm e $r = 99$ nm, vistos de cima. Fig. (b) apresenta a seção transversal no centro do nanotoro a fim de mostrar as componentes da magnetização apontando ao longo da direção fora do plano.	93
6.7	Diagrama de fases mostrando a configuração do estado fundamental em função dos parâmetros geométricos que descrevem o nanotoro magnético. Preto e amarelo são regiões que representam, respectivamente, configurações VT e NV. Pontos vermelhos mostram a linha de transição entre estados VT e NV obtido através de simulações micromagnéticas. Pontos azuis ilustram resultados de simulações micromagnéticas para a auto-interseção do toro.	94

Notações e Convenções

- Quando o sistema de unidades SI não é utilizado, unidades naturais são assumidas, como, por exemplo, $\hbar = c = 1$, sem alteração na compreensão da fenomenologia;
- h corresponde a constante de Planck e \hbar corresponde a $h/2\pi$;
- EHQ = Efeito Hall Quântico
- IT = Isolante Topológico
- DM = Dzyaloshinskii-Moriya
- IDM = Interações Dzyaloshinskii-Moriya
- LLG = Landau-Lifshitz-Gilbert
- TK = Tipo-Tokamak
- VT = Vórtice Toroidal
- VP = Vórtice Poloidal
- Demais definições e termos são esclarecidos ao longo do texto.

Sumário

1	Introdução	14
2	Férmions de Majorana e Cadeia de Kitaev	25
2.1	Introdução	25
2.2	Cadeia de Kitaev	28
2.3	Potencial Efetivo	34
2.4	Diagrama de Fases Supercondutor e Número de Partículas	38
3	Supercondutividade Induzida em Isolantes Topológicos	43
3.1	Introdução	43
3.2	Potencial Efetivo	45
3.3	Onda s ; $\Delta(r, r') = \Delta \delta(r - r')$	50
3.4	Onda p ; $\tilde{\Delta}(p, -p') = i \left \tilde{\Delta} \right (p_x + ip_y) \delta_{p,p'}$	52
3.4.1	Análise em $T = 0$	53
3.4.2	Análise em Temperatura finita	56
4	Supercondutividade Topológica em Cupratos	58
4.1	Introdução	58
4.2	Férmions de Majorana em Cupratos	60
5	Transição de fase topológica no transporte de skyrmion	69
5.1	Introdução	69
5.2	Modelo Teórico	71

5.2.1	Método	75
5.2.2	Resultados	76
6	Configuração Magnética em Nanocasca Toroidal	84
6.1	Introdução	84
6.2	Configurações de Mínima Energia	86
6.2.1	Núcleo de Vórtice	89
7	Conclusões e Perspectivas	95
7.1	Conclusões	95
7.2	Perspectivas	99
A	A função de partição para sistemas quânticos	101
B	Soma sobre as frequências de Matsubara	104
C	Operadores momento em coordenadas polares	106
D	Propriedades Geométricas do Toro	108

Capítulo 1

Introdução

Em 1980, um novo sistema cujas propriedades proporcionaram mais um desafio e entendimento sobre a física de matéria condensada foi descoberto. Tal sistema apresentava o então chamado Efeito Hall Quântico (EHQ), podendo se referir ao Efeito Hall Quântico Inteiro [1] ou ao Efeito Hall Quântico Fracionário [2,3]. O EHQ Fracionário, por sua vez, não podia ser explicado utilizando conceitos conhecidos da teoria de muitos corpos tradicional, ou mais especificamente os paradigmas de Landau, que dispõem sobre a teoria dos líquidos de Fermi e a teoria da quebra de simetria.

Na teoria de líquidos de Fermi, elétrons são tratados essencialmente como partículas livres, o que não se aplica a um sistema com EHQ Fracionário, que é fortemente correlacionado. Já segundo a teoria da quebra de simetria de Landau, diferentes fases da matéria são distinguidas por diferentes simetrias, associando a transição de fase à mudança de simetria do sistema. Porém, o EHQ Fracionário apresenta diferentes fases à temperatura zero, mas que possuem a mesma simetria. Ou seja, como ambas as teorias de líquidos de Fermi e da quebra de simetria de Landau falharam em descrever um sistema que apresenta EHQ Fracionário, principalmente quanto à inexistência de quebra de simetria, era necessário a introdução de novos modelos tanto matemáticos quanto físicos capazes de, quando aplicados à sistemas desse tipo, explicar como o fenômeno acontece e prever seu comportamento.

O EHQ ocorre ao se aplicar um forte campo magnético e um campo elétrico, transverso ao primeiro, em um sistema eletrônico bidimensional. É observado que ao variar o campo magnético, perpendicular ao plano, a condutividade Hall varia gradualmente com platôs em valores quantizados, enquanto a condutividade longitudinal se anula precisamente nesses platôs, o que sugere a ausência de transporte longitudinal. Nesse regime, enquanto o *bulk* do material possui um *gap* de energia, caracterizando um estado isolante, há uma corrente elétrica ao longo das bordas, que persiste mesmo se houver impurezas e, diferente de como ocorre em condutores convencionais, não se dissipa. Apesar de não haver quebra de simetria, esse novo estado da matéria possui características especiais e pode ser diferenciado de outros estados quanto ao chamado ordenamento topológico, sendo o primeiro estado quântico que difere topologicamente dos estados conhecidos até então [4, 5].

A topologia de um sistema, que independe de algumas de suas propriedades, está associada a um invariante chamado invariante topológico. Do ponto de vista geométrico, dois sistemas são topologicamente equivalentes se um puder ser deformado suave e continuamente em outro, sem que o rasgue ou fure. Uma esfera pode ser deformada, em tais condições, em um cubo ou cilindro, por exemplo. Também existe o clássico exemplo, descrito na Fig. 1.1, em que uma caneca é deformada em uma figura geométrica chamada toro, que lembra um *donut*. Nesse contexto, os detalhes geométricos dos objetos não são importantes, sendo seu invariante topológico conhecido como *genus* e que identifica sua topologia através da quantidade de buracos que as geometrias possuem [4].

Já as classificações topológicas em física não definem os estados somente perante deformações geométricas suaves e contínuas. Podemos, por exemplo, realizar variações adiabáticas e contínuas na Hamiltoniana de um sistema de muitos corpos sem que o *gap* de energia se feche, mantendo o estado topologicamente invariante. Porém, caso o *gap* se feche e em seguida se abra durante tal variação adiabática, com alguma mudança de sinal associada, diz-se que os dois estados (antes e depois



Figura 1.1: Uma caneca pode ser deformada suave e continuamente em um toro, que são topologicamente equivalentes. Ambas são formas geométricas de $genus = 1$.

do fechamento do *gap*) são topologicamente distintos. Isso implica uma mudança do invariante topológico e das propriedades do sistema que se mantém invariantes durante a fase topológica [5].

Procuramos, então, por materiais cujas propriedades levem a uma topologia não trivial e que podem ser estudados do ponto de vista físico. Nesse trabalho, abordaremos dois tipos de sistemas que apresentam topologia não trivial. O primeiro tipo compreende sistemas de matéria condensada com estados supercondutores em que topologia é associado à emergência de partículas específicas, e será abordado nos Capítulos 2, 3 e 4. No outro, estão sistemas magnéticos, protegidos topologicamente pela sua geometria ou pela sua própria configuração magnética, que será abordado nos Capítulos 5 e 6.

Estados supercondutores podem ser capazes de possuir características topológicas que levam à emergência de partículas conhecidas como férmions de Majorana [6, 7]. Essas partículas são associadas à um invariante topológico, o número de Majorana, e permanecem no sistema sob deformação contínua da Hamiltoniana até que o *gap* se feche. Sistemas que apresentam condições para o surgimento de

estados supercondutores topológicos tem sido estudado extensivamente [8–10] e tem se mostrado promissores tanto em 1D quanto em 2D, e sua emergência auxilia tanto na criação de sistemas de computação quântica [11, 12] quanto na construção de um sintonizador termoelétrico [13], por exemplo.

Em uma dimensão, a construção mais simples possível para um sistema supercondutor que apresenta tal ordem topológica é conhecida como cadeia de Kitaev [9]. Nesse sistema, férmions de Majorana emergem espacialmente separados, em modo zero de energia, nas extremidades da cadeia. Há também o estudo da indução de supercondutividade na superfície de isolantes topológicos 3D, que são materiais que possuem estados de borda condutores com proteção topológica assim como no EHQ, tanto no contorno de isolantes bidimensionais como na superfície de isolantes tridimensionais. Essa indução produz um estado de supercondutividade topológica em duas dimensões, que está associada à emergência de férmions de Majorana ligados à um vórtice. Tal vórtice é relacionado ao parâmetro supercondutor induzido na superfície do isolante topológico (IT) [8, 10], como mostrado na Fig. 1.2, onde um filme supercondutor de onda p é aproximado da superfície de um isolante topológico tridimensional. Nesse caso, tanto a supercondutividade quanto as características do parâmetro supercondutor no isolante topológico são herdadas do filme supercondutor. Além disso, o estudo acima produz resultados que sugerem uma possível supercondutividade topológica em cupratos, que são sistemas baseados em planos de cobre e oxigênio e que apresentam estados de supercondutividade de alta temperatura crítica. Cupratos supercondutores, portanto, se tornam fortes candidatos à possuírem topologia não trivial e emergência de férmions de Majorana.

Para entender como férmions de Majorana se comportam nesses materiais é interessante conhecer seu potencial efetivo, que pode ser usado para o cálculo de propriedades termodinâmicas, por exemplo. Com esse propósito, no Capítulo 2 começamos a análise do modelo de Kitaev calculando o potencial efetivo dos férmions de Majorana. Em seu cálculo, usamos técnicas de integral funcional na representação do

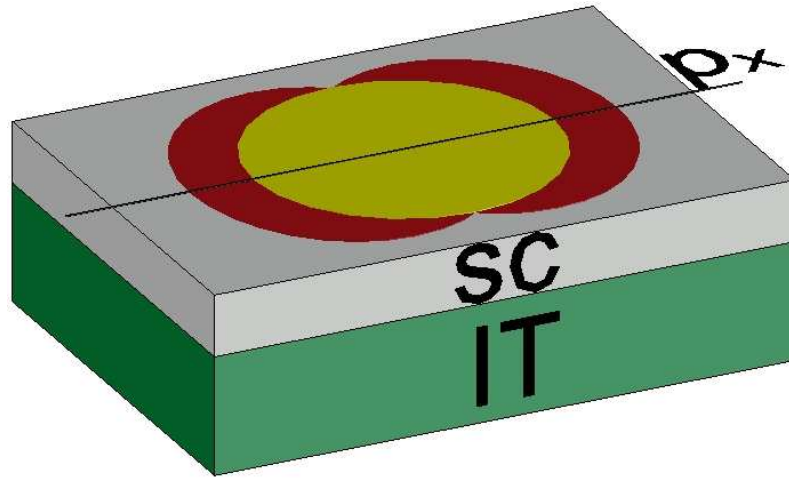


Figura 1.2: Isolante topológico 3D coberto com uma camada de filme supercondutor. São esperados modos zero de Majorana ligados ao vórtice dado por um parâmetro supercondutor de onda p .

tempo complexo e encontramos o logaritmo natural da função de partição como função dos parâmetros de *hopping* e supercondutor, da temperatura e do potencial químico. O mínimo desse potencial efetivo, com respeito ao *gap* supercondutor, Δ , mostra o comportamento qualitativo esperado de Δ em função da temperatura. Além disso, através do cálculo de número de partículas no sistema, foi possível mostrar que no estado topológico deve existir uma densidade de partículas tanto positiva quanto negativa, caracterizando estados eletrônicos e de buracos, respectivamente.

Usando técnicas análogas, no Capítulo 3 calculamos o potencial efetivo para a superfície de um isolante topológico com supercondutividade induzida. Esse potencial efetivo depende do tipo de *gap* herdado do material supercondutor. Para onda s , a equação de *gap* encontrada foi obtida anteriormente considerando um sistema eletrônico de Dirac quase-bidimensional, no cálculo para descrever supercondutividade de alta temperatura crítica em cupratos supercondutores. Para onda p , o potencial efetivo à temperatura nula mostra a existência de uma transição de fase quântica, separando os estados normal e supercondutor, como função da interação elétron-elétron. Como a fase supercondutora depende de parâmetros que descrevem

o supercondutor e o IT, e não ocorre para alguns valores específicos, o resultado mostra condições para que apareça uma supercondutividade induzida, dependendo de característica dos materiais usados. Já em temperatura não nula, a equação de *gap* exibe o comportamento qualitativo esperado de Δ em função da temperatura.

A forma da equação de *gap* do resultado acima sugere a existência de supercondutividade topológica em supercondutores de alta temperatura crítica do tipo cupratos. Cupratos são materiais que dispõem de uma estrutura em camadas, em que supercondutividade ocorre naquelas respectivas aos planos de cobre e oxigênio, onde seriam encontrados estados emergentes de férmions de Majorana. No Capítulo 4 pesquisamos a emergência de férmions de Majorana em modo zero de energia. Para isso, partimos do conhecido modelo de spin férmion, que descreve como supercondutividade emerge em uma rede de cobre e oxigênio bidimensionais. e que é um forte candidato a explicar como supercondutividade de alta temperatura crítica ocorre em cupratos.

Por outro lado, configurações magnéticas, tais como vórtices e skyrmions, também podem exibir características topológicas, sendo que a análise teórica de tais padrões magnéticos pode ser realizada sob o ponto de vista da teoria de homotopia [14]. Portanto, as propriedades estáticas e dinâmicas desses sistemas magnéticos topológicos podem apresentar uma relação estrita com a geometria da estrutura. Nesse contexto, um tópico de pesquisa que se desenvolve rapidamente em nanomagnetismo é o estudo de propriedades magnéticas e topológicas de sistemas com skyrmions magnéticos.

Os skyrmions magnéticos são estruturas de spin, estáveis topologicamente, em que a magnetização central se encontra na direção oposta à sua fronteira. São formados, especialmente, na presença de um campo magnético e devido à competição das interações de troca e de Dzyaloshinskii-Moriya (DM) [15, 16]. De acordo com direção da interação de DM, os skyrmions formados são do tipo Bloch ou do tipo Néel, que diferem quanto a sua helicidade, definida como o ângulo da rotação global

em torno do eixo z . Para skyrmions de Néel, por exemplo, a helicidade é zero. A Fig. 1.3 representa um skyrmion de Bloch em uma rede de spins hexagonal. A Fig. 1.4 representa o campo vetorial dos dois tipos de skyrmions; A Fig. 1.4(a) é relativa ao skyrmion de Bloch enquanto a Fig. 1.4(b) ao skyrmion de Néel. Além do interesse em entender a formação, estabilidade e propriedades de tal estrutura física com proteção topológica, a possibilidade de aplicação de skyrmions, como bits de informação, na construção de dispositivos eletrônicos, por exemplo dispositivos de memória *racetrack*, [17–19] tornam seu estudo foco de intensa investigação. Há também um grande interesse em seu movimento, realizado por baixas densidades de correntes e gradientes de temperatura, o que permite manipular sua localização, tendo também potencial aplicabilidade em spintrônica [17, 20–32]. Além disso, Skyrmions magnéticos tem sido observados em magnetos quirais [30, 33–37], no *bulk* de cristais não centrossimétricos [33, 38–40], em filmes finos de helimagnetos cúbicos [37, 41, 42] e filmes ultrafinos [43, 44].

No Capítulo 5 realizamos simulações de Monte-Carlo a fim de obter a deformação do skyrmion enquanto se movimenta. À medida que o skyrmion se move é gerado um auto-campo que depende de sua velocidade e que, adicionado ao campo externo, o deforma. Com essa deformação calculamos a contribuição de força dissipativa da equação de Thiele, \mathcal{D} , em função da velocidade do skyrmion. Tal contribuição é diretamente relacionada à massa, tendo assim ambas o mesmo comportamento à medida que a velocidade do skyrmion varia. Com isso, conseguimos calcular a relação da velocidade do skyrmion e sua massa. Também encontramos a energia DM por sítio para cada velocidade, o que reforça o estudo do modo como se deforma o skyrmion.

No mesmo capítulo também estudamos efeitos para velocidades altas. Acima de uma velocidade crítica surgem condições para o aumento da quantidade de skyrmions na rede, além de causar sua deformação simultaneamente. Esse aumento do número de skyrmions claramente caracteriza uma transição de fase topológica na rede. Com

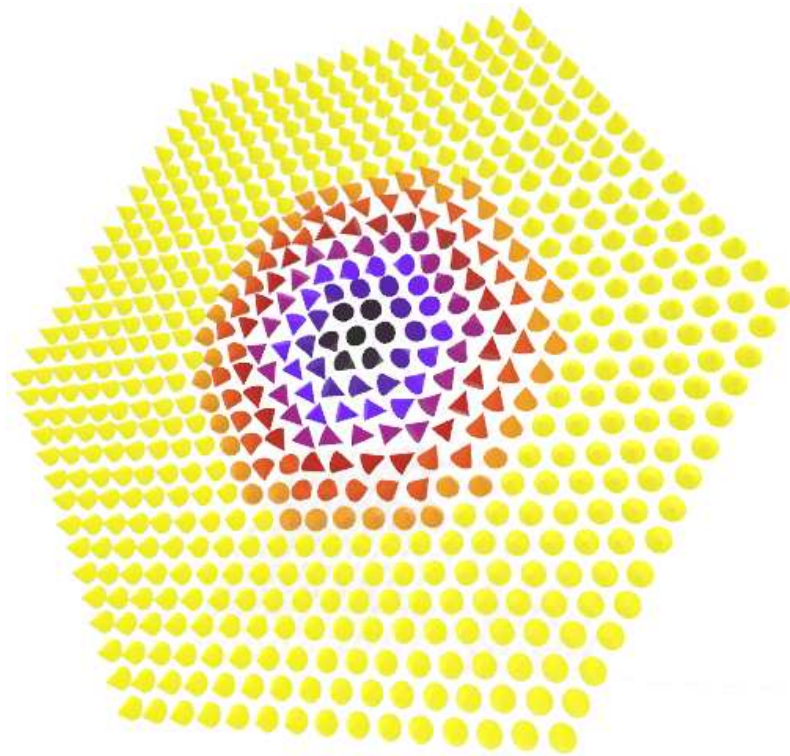


Figura 1.3: Representação de um skyrmion em uma rede de spins hexagonal.

isso, é esperado que haja uma consequente mudança dos termos de massa da não diagonal, além da mudança de carga topológica total da rede. Por outro lado, encontra-se um limite para a quantidade de skyrmions formados, que depende do tamanho da rede.

Outro tópico de intensa pesquisa relacionado a sistemas magnéticos com características topológicas são de sistemas magnéticos curvos [45]. De fato, a grande proporção entre volume e superfície induz efeitos de superfície importantes nas propriedades de nanopartículas [46, 47]. Nesse contexto, foi mostrado que a energia e estabilidade de vórtices magnéticos e skyrmions depende da geometria do nanomagnet [48–50]. Além disso, efeitos de curvatura induzida na energia, estados fundamentais magnéticos e excitações de nanopartículas magnéticas tem sido analisadas em vários trabalhos que descrevem as propriedades de magnetização em nanomag-

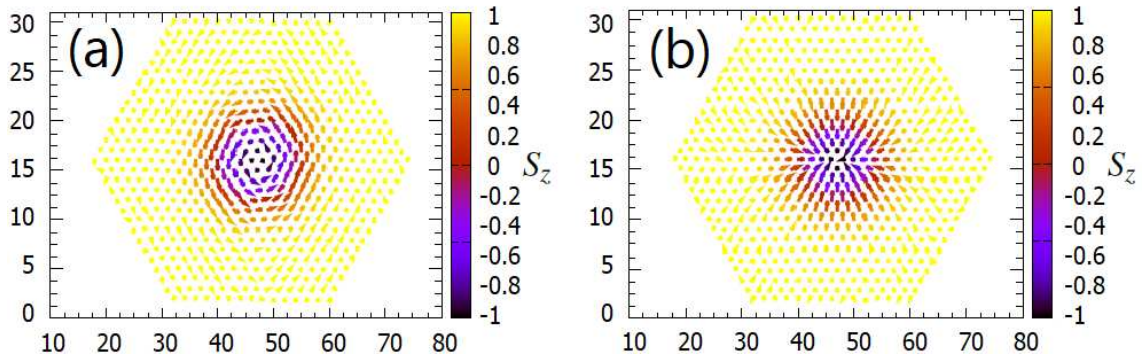


Figura 1.4: (a) Representação de um skyrmion de Bloch e (b) representação de um skyrmion de Néel.

netos curvos como a esfera [51, 52], catenoide e hiperboloide [53–55] e cones [56].

Uma geometria curva em particular, bastante interessante, que por si só é um sistema com geometria topológica e que parece ser adequada, é a de um toro. De fato, a geometria toroidal é bastante apropriada para se estudar efeitos de curvatura em sistemas magnéticos uma vez que engloba uma interpolação entre curvaturas gaussianas negativa (pseudoesfera ou plano hiperbólico) e positiva (esfera). Essa geometria tem recebido considerável atenção na literatura e tem sido estudada teoricamente em diferentes contextos recentemente. Alguns exemplos são armadilhas toroidais para condensação de Bose-Einstein [57], nanotubos de carbono fornecendo sistemas de dimensão quase zero sempre que os anéis são muito pequenos [58, 59] e transistores de efeito de campo em forma de toro para aplicações tecnológicas [60]. Do ponto de vista teórico, a geometria toroidal tem sido considerada na análise de propriedades de isolantes topológicos [61], a fim de determinar a relação de dispersão e padrões de campo de plasmons localizados na superfície [62, 63], para descrever excitações de spin topológicas 2D [64], e realizar simulações de dinâmica molecular dos movimentos ciclotron estáveis dos íons e moléculas de água em estruturas de carbono [65].

Particularmente em nanomagnetismo, tem sido mostrado que nanotoros ferro-

manéticos podem suportar uma configuração de vórtice como uma magnetização de estado fundamental para tamanhos menores que nanoanéis cilíndricos [49, 66]. O trabalho analítico prévio considerou uma configuração de vórtice puramente na superfície em uma nanopartícula toroidal [49], que leva a uma energia dipolar nula associada ao estado de vórtice. Ainda assim, simulações micromagnéticas tem revelado que pequenos desvios da direção azimutal podem produzir cargas magnetostáticas e então o vórtice apresenta energia dipolar não nula [66]. O desvio do estado puramente na superfície é associado com uma anisotropia efetiva e interações Dzyaloshinskii-Moriya (IDM) induzidas por curvatura [67]. De fato, tem sido mostrado que devido à variação da curvatura do toro, a IDM induzida por curvatura gera dois pares vórtice-antivórtice como estados remanescentes em nanopartículas toroidais ocas com raio interno grande [68].

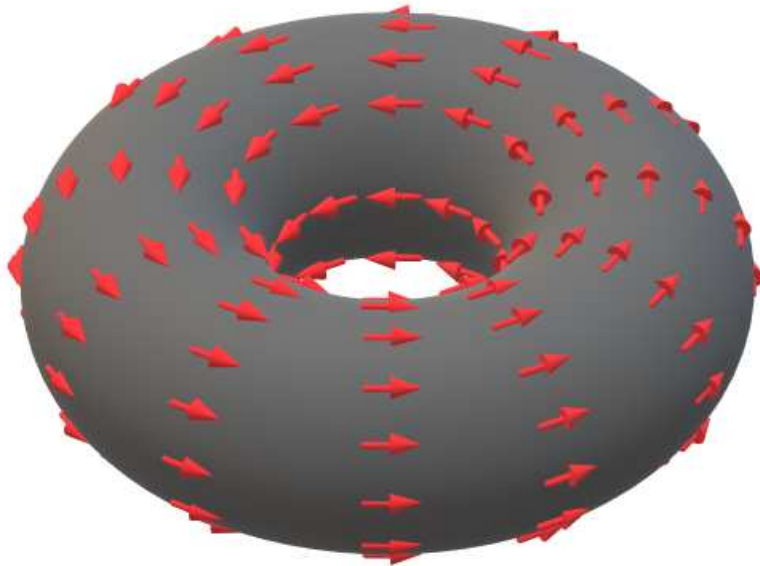


Figura 1.5: Representação de uma configuração magnética na superfície de uma nanocasca toroidal correspondente a um vórtice toroidal.

No Capítulo 6 estudamos a magnetização em uma casca toroidal rígida considerando o efeito de curvatura na energia magnética. Analisamos soluções estáticas

considerando a interação dipolar como uma anisotropia na superfície. Mais especificamente, olhamos para a solução estática geral e mostramos que a energia da magnetização puramente tangencial é minimizada para um vórtice azimutal, configuração esta chamada de vórtice toroidal e que está representada pela Fig. 1.5, enquanto é maximizada para configurações do tipo vórtice poloidal e tokamak. De fato, a solução analítica do modelo adotado prevê a alta estabilidade de um vórtice azimutal na superfície. Contudo, simulações micromagnéticas tem mostrado a possibilidade do desenvolvimento de uma componente da magnetização fora da superfície. Portanto, partindo de um *ansatz* que descreve um modelo de núcleo de vórtice, mostramos que essa energia do vórtice magnético pode decrescer pelo desenvolvimento de um núcleo de vórtice no nanotoro magnético, bem como ocorre em suas contrapartes cilíndricas [69]. A região na qual o núcleo de vórtice aparece depende do parâmetro geométrico do toro. Através de cálculos analíticos e simulações micromagnéticas, obtemos o diagrama de fases que mostra regiões de estabilidade do estado puramente na superfície e o vórtice com núcleo.

Capítulo 2

Férmions de Majorana e Cadeia de Kitaev

2.1 Introdução

Férmions de Majorana [6, 7] são partículas exóticas propostas em 1937 por Ettore Majorana, previstas teoricamente e que estão associadas a soluções reais da equação de Dirac, mas que ainda não foram observadas como partículas livres [8]. A equação de Dirac, por sua vez, descreve férmions relativísticos de spin $1/2$ e propõe, dentre outros, o conceito de partícula e antipartícula: férmions iguais com cargas opostas. Porém, como a solução para férmions de Majorana prevê que estes são iguais às suas próprias antipartículas, sua carga deve ser nula.

O formalismo de segunda quantização pode ser usado para descrever sistemas eletrônicos de muitos corpos. Nesse formalismo, sistemas físicos são descritos usando operadores que criam e aniquilam partículas, e que possuem informações fundamentais. Do ponto de vista de teoria de campos, partículas tais como os elétrons são descritas pela sua energia, momento e spin. Em um sólido, um elétron é considerado como uma partícula que ocupa um nível de energia, enquanto um buraco descreve um nível desocupado. Por analogia, como o elétron possui carga negativa e o buraco é seu análogo com carga positiva, elétrons e buracos são suas respectivas partículas e antipartículas, em um contexto de matéria condensada. Já um férmion de Majorana

não possui carga, fazendo com que operadores de aniquilação e criação tenham o mesmo efeito.

É possível fazer uma descrição matemática em que operadores de férmions de Majorana são descritos através de operadores eletrônicos. Cada férmion de Majorana do sistema pode ser dado pela superposição de partícula e antipartícula como

$$\gamma_{j1} = c_j^\dagger + c_j, \quad \gamma_{j2} = i(c_j^\dagger - c_j), \quad (2.1)$$

em que c_j^\dagger e c_j são operadores de criação e aniquilação de elétron, respectivamente, com números quânticos denotados pelo índice j . Como condição necessária temos que γ aniquila ou cria um férmion de Majorana, uma vez que $\gamma^\dagger = \gamma$. Por esse motivo, Férmions de Majorana podem emergir como superposições de um elétron e um buraco que se movem livremente, cada um tendo a mesma direção e spin. Nesse contexto, tais férmions emergem de uma superposição entre graus de liberdade eletrônicos (partículas) e de buracos (antipartículas). Seu spin pode interagir com o spin do núcleo atômico de um material e, portanto, pode ser detectado usando-se técnicas de ressonância nuclear [8].

Da perspectiva de física de altas energias, férmions de Majorana são essencialmente a *metade* de um férmion de Dirac ordinário. Devido à redundância partícula-buraco, um único estado fermiônico é associado com cada par de nível de energia $\pm E$, enquanto a presença ou ausência de um férmion de Majorana nesse estado define um sistema de dois níveis com uma divisão de energia E . A existência de férmions de Majorana pode ajudar a explicar porque o universo tem uma assimetria final entre matéria e antimatéria, uma vez que neutrinos de Majorana obedecem aos requerimentos de Sakharov e contribuiriam no estudo da leptogenese [70].

Já do ponto de vista de física de matéria condensada, as relações na Eq. (2.1) compreendem férmions de Majorana como superposição de graus de liberdade eletrônicos e de buracos. Procuramos então sistemas que possuem tal característica, que ocorre naturalmente nos conhecidos supercondutores, onde as quasipartículas emergentes são, de fato, produto dessa superposição [71]. Porém, o estudo

de férmions de Majorana em sistemas supercondutores não se restringe à supercondutores do tipo BCS, que explica ordenamento supercondutor a baixas temperaturas através da interação entre elétrons e fônons. Sua emergência também pode ser estudada em sistemas de muitos corpos cuja descrição efetiva mostra o aparecimento de supercondutividade independente da natureza da formação dos pares de cooper, tal como em sistemas de férmions pesados e supercondutores de alta temperatura crítica [72].

Tanto a medição quanto a utilização de férmions de Majorana emergentes em sistemas de matéria condensada podem se tornar complexas, uma vez que dois destes férmions descritos por um único elétron são ligados e ocupam o mesmo sítio. Porém, para supercondutores em determinadas condições, tais férmions podem ser desacoplados, formando pares espacialmente separados e em modo zero de energia [8]. Isso proporciona um longo tempo de decoerência, uma vez que a informação quântica é armazenada não localmente, protegendo tal informação de efeitos de decoerência do ambiente. Além disso, os estados de majorana em modo zero são separados do primeiro estado excitado por um minigap de energia, protegendo-os de excitações de baixas energias no sistema. Já o estudo da mudança de um estado com modo zero e férmions espacialmente separados para um estado sem os mesmos mostra que existe uma transição de fase caracterizada como transição de fase topológica. Isso ocorre devido à existência de dois estados supercondutores que não podem ser conectados adiabaticamente sem que o *gap* de energia se feche, distinguindo-os quanto à sua topologia. Esses tipos de transições apresentam fases com mesmas simetrias contínuas mas que podem ser caracterizadas por um invariante topológico. No nosso caso, o invariante topológico é denominado número de Majorana e determina se um material apresentará ordem topológica ou não no estado supercondutor, através de suas características no seu estado normal. Quando o sistema apresenta topologia não trivial, o modo zero é protegido de deformações na Hamiltoniana, sendo destruído somente quando o gap de energia se fecha através de uma deformação adiabática,

ocorrendo a transição para um estado com topologia trivial [8,10].

As características citadas, por serem necessárias para um ótimo armazenamento de informação quântica, tornam supercondutores topológicos, que são aqueles que apresentam alguma fase com topologia não trivial, fortes candidatos para criação de robustos sistemas de computação quântica, e tem sido alvo de estudos atuais [11,12]. Também se estuda a possibilidade de criação de um sintonizador termoeétrico assistido por férmions de Majorana, em que o transporte termoeétrico através de um ponto quântico depende de seu acoplamento com férmions de Majorana [13]. Além disso, é proposto teoricamente que supercondutividade possa ser induzida em uma superfície de um isolante topológico, produzindo as condições necessárias para a formação de supercondutividade topológica [73]. De fato, foi observado experimentalmente um férmion de Majorana localizado no final de um fio de antimoneto de índio, em contato com um metal normal, que possui supercondutividade induzida por proximidade a um supercondutor [74].

2.2 Cadeia de Kitaev

Como mencionado, espera-se que férmions de Majorana espacialmente separados e em modo zero de energia emergem em sistemas supercondutores. Podemos então trabalhar, inicialmente, com um sistema supercondutor mais simples possível. Suponha uma cadeia discreta unidimensional, com N sítios e condições de contorno abertas. Elétrons ocupam os sítios dessa cadeia, possuem um potencial químico μ que determina a ocupação dos estados e não possuem spin, além de poderem se movimentar pela rede, movimento este descrito por um parâmetro de *hopping* t . Por fim, o sistema deve oferecer um ordenamento supercondutor que pode ser representado por um parâmetro supercondutor real Δ . Esse sistema é conhecido como cadeia de Kitaev, e sua Hamiltoniana é [9]

$$H = \sum_j \left[-t \left(c_j^\dagger c_{j+1} + H.c. \right) - \mu \left(c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} \right) + \left(\Delta c_{j+1}^\dagger c_j^\dagger + H.c. \right) - \frac{\Delta^2}{g} \right], \quad (2.2)$$

em que c_j^\dagger e c_j são operadores de criação e aniquilação de elétrons, respectivamente, no sítio j e g a interação entre os elétrons. O último termo na Eq. (2.2) é proveniente de uma aproximação de campo médio no termo quártico original que descreve sistemas supercondutores [75]. Para o estudo do comportamento de férmions de Majorana emergentes, deseja-se obter a Hamiltoniana da Eq. (2.2) em termos dos operadores de Majorana, reescrevendo os operadores fermiônicos da forma

$$c_j = \frac{1}{2} (\gamma_{j,1} + i\gamma_{j,2}), \quad c_j^\dagger = \frac{1}{2} (\gamma_{j,1} - i\gamma_{j,2}), \quad (2.3)$$

em que γ_{j1} e γ_{j2} são operadores de Majorana que obedecem as seguintes relações no espaço real

$$\{\gamma_{i,\alpha}, \gamma_{j,\beta}\} = 2\delta_{i,j}\delta_{\alpha,\beta}, \quad \gamma_{i,\alpha}^\dagger = \gamma_{i,\alpha}. \quad (2.4)$$

Usando (2.3) e (2.4), portanto, a Hamiltoniana fica

$$H = \frac{i}{2} \sum_j \left[-\mu\gamma_{j,1}\gamma_{j,2} + (t + \Delta)\gamma_{j,2}\gamma_{j+1,1} + (-t + \Delta)\gamma_{j,1}\gamma_{j+1,2} - \frac{\Delta^2}{g} \right]. \quad (2.5)$$

A Eq. (2.5) mostra acoplamentos tanto de férmions de Majorana de mesmos sítios eletrônicos, quanto de sítios vizinhos. O objetivo, então, é verificar se o sistema, em determinadas condições, fornece a emergência de férmions de Majorana espacialmente separados através do único acoplamento de férmions de sítios vizinhos, ficando desacoplados aqueles das extremidades. Para isso, vamos supor, inicialmente, a condição em que $\Delta = t = 0$. Nesse regime, a Hamiltoniana da Eq. (2.5) mostra que todos os férmions de Majorana de mesmo sítio estão acoplados entre si. Além disso, a Hamiltoniana da Eq. (2.2) mostra que esse estado é respectivo a um simples sistema de níveis ocupados ou desocupados por elétrons. Porém, se supormos um estado em que $\Delta = t$ e $\mu = 0$, a Eq. (2.5), negligenciando o último termo que não depende dos operadores de Majorana, fica

$$H = it \sum_{j=1}^{N-1} \gamma_{j,2}\gamma_{j+1,1}, \quad (2.6)$$

mostrando que somente férmions de Majorana de sítios vizinhos são acoplados, não contribuindo para a Hamiltoniana os férmions das extremidades, $\gamma_{1,1}$ e $\gamma_{N,2}$, que se encontram espacialmente separados e em modo zero de energia. As Figs. 2.1(a) e 2.1(b) mostram tanto o acoplamento dos férmions de Majorana de mesmo sítio, sem a existência de férmions desacoplados, quanto o acoplamento de férmions de sítios vizinhos, evidenciando em vermelho aqueles das extremidades que estão desacoplados, respectivamente.

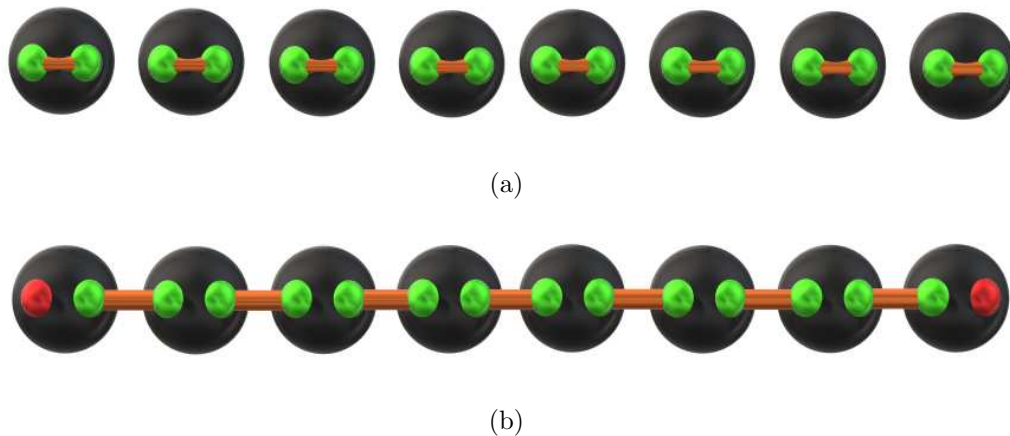


Figura 2.1: (a) Cadeia para $\Delta = t = 0$, em que férmions de Majorana de mesmo sítio são acoplados. (b) Cadeia para $\Delta = t$ e $\mu = 0$, em que vizinhos são acoplados, restando dois férmions espacialmente separados e em modo zero de energia nas extremidades.

Portanto, o estudo detalhado desse sistema é relevante uma vez que é possível obter dois férmions de Majorana espacialmente separados, ambos em modo zero de energia. Faremos isso calculando o potencial efetivo dos férmions de Majorana que pode auxiliar, por exemplo, na obtenção de propriedades termodinâmicas do sistema, para mostrar como a temperatura interfere na fase topológica, caso interfira, e para estudar dinâmica usando simulações computacionais, em que as partículas se encontram na presença de demais interações, bem como outras propriedades física de sistemas de matéria condensada cuja estrutura seja similar à estudada. Além

disso, também pode ser útil na otimização e controle de computadores quânticos que usam supercondutividade topológica e férmions de Majorana.

Para a obtenção do potencial efetivo, mais adiante, e para o estudo das autoenergias do sistema, devemos realizar uma transformada de Fourier nos campos de Majorana e levar a Hamiltoniana para o espaço dos momentos, fazendo

$$\begin{aligned}\gamma_{j,m}^\dagger &= \frac{1}{V^{\frac{1}{2}}} \sum_n \sum_p e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}_j + \omega_n \tau)} \tilde{\gamma}_{m,n,p}^\dagger \\ \gamma_{j,m} &= \frac{1}{V^{\frac{1}{2}}} \sum_n \sum_p e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}_j + \omega_n \tau)} \tilde{\gamma}_{m,-n,-p},\end{aligned}\quad (2.7)$$

onde pode-se ver que, para que a Eq. (2.4) seja satisfeita, $\gamma_{j,n,p}^\dagger = \gamma_{j,-n,-p}$. Além disso, ω_n correspondem às frequências de Matsubara que, para férmions, são escritas como $\omega_n = (2n + 1) \pi T$ [76].

No espaço dos momentos, os campos de Majorana obedecem a relações

$$\begin{aligned}\left\{c_k^\dagger, c_l\right\} &= \frac{1}{4} \left\{\tilde{\gamma}_{1,k}^\dagger - i\tilde{\gamma}_{2,k}^\dagger, \tilde{\gamma}_{1,l} + i\tilde{\gamma}_{2,l}\right\} = \delta_{k,l} \\ \left\{\tilde{\gamma}_{1,k}^\dagger, \tilde{\gamma}_{1,l}\right\} + \left\{\tilde{\gamma}_{2,k}^\dagger, \tilde{\gamma}_{2,l}\right\} + i\left\{\tilde{\gamma}_{1,k}^\dagger, \tilde{\gamma}_{2,l}\right\} - i\left\{\tilde{\gamma}_{2,k}^\dagger, \tilde{\gamma}_{1,l}\right\} &= 4\delta_{k,l}.\end{aligned}\quad (2.8)$$

Como o valor da relação de anti-comutação deve ser independente da ordem dos índices 1 e 2 dos férmions, o terceiro e o quarto termos devem ser iguais. Porém, como ambos possuem sinais opostos, a única solução possível é um valor zero para a relação de anti-comutação, isto é, para férmions de Majorana distintos

$$\left\{\tilde{\gamma}_{i,k}^\dagger, \tilde{\gamma}_{j,l}\right\} = 0; \quad i \neq j, \quad (2.9)$$

enquanto os dois primeiros termos tem o mesmo valor, o que leva à uma relação de anti-comutação geral da forma

$$\left\{\tilde{\gamma}_{i,n,p}^\dagger, \tilde{\gamma}_{j,n',p'}\right\} = 2\delta_{i,j}\delta_{n,n'}\delta_{p,p'}. \quad (2.10)$$

Usando também a propriedade

$$\int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_n - \omega_{n'})\tau} = \beta\delta_{n,n'}, \quad (2.11)$$

a transformada de Fourier da Hamiltoniana é dada por

$$H = \sum_{p,n} \beta i \tilde{\gamma}_{n,p}^\dagger \mathcal{A} \tilde{\gamma}_{n,p} - \frac{\Delta^2}{g}, \quad (2.12)$$

em que $\tilde{\gamma}_{n,p}^\dagger = \begin{pmatrix} \tilde{\gamma}_{1,n,p}^\dagger & \tilde{\gamma}_{2,n,p}^\dagger \end{pmatrix}$ e a matriz \mathcal{A} escrita como

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & D^* \\ -D & 0 \end{pmatrix}; \quad D = [\mu + 2t \cos(p) + 2i\Delta \sin(p)] / 4, \quad (2.13)$$

cujo espectro de excitação é

$$E(q) = \pm \sqrt{(2t \cos(q) + \mu)^2 + (2\Delta \sin(q))^2}. \quad (2.14)$$

Como mencionado anteriormente, dois estados que não podem ser ligados adiabaticamente sem que se feche o gap de energia possuem fases distintas. A Eq. (2.14) mostra que, para $\Delta \neq 0$, o gap se fecha quando $\mu = \pm 2t$. A Fig. 2.2 mostra a transição entre as duas fases, quando $|\mu| > |2t|$ e quando $|\mu| < |2t|$, sendo o último representado pela região verde, e que é caracterizada por um tipo especial de transição chamada transição de fase topológica. A linha vermelha separa as duas regiões, quando $\mu = \pm 2t$. Poderíamos induzir que o estado em que $|\mu| < |2t|$ é topológico, uma vez que o estado em que $|\mu| > |2t|$ é bem conhecido, representando claramente uma fase com topologia trivial. Porém, apesar de as duas fases apresentarem as mesmas simetrias, elas podem ser distinguidas por uma quantidade denominada invariante topológico.

Para o caso 1D acima, o invariante topológico é conhecido como número de Majorana e, no limite em que Δ é muito menor que as outras escalas de energias relevantes, pode ser calculado como

$$\mathcal{M} = (-1)^{-\nu}, \quad (2.15)$$

onde ν é a quantidade de pontos de Fermi do sistema no seu estado normal, no intervalo de $(0, \pi)$, representando a metade direita da zona de Brillouin. Quando

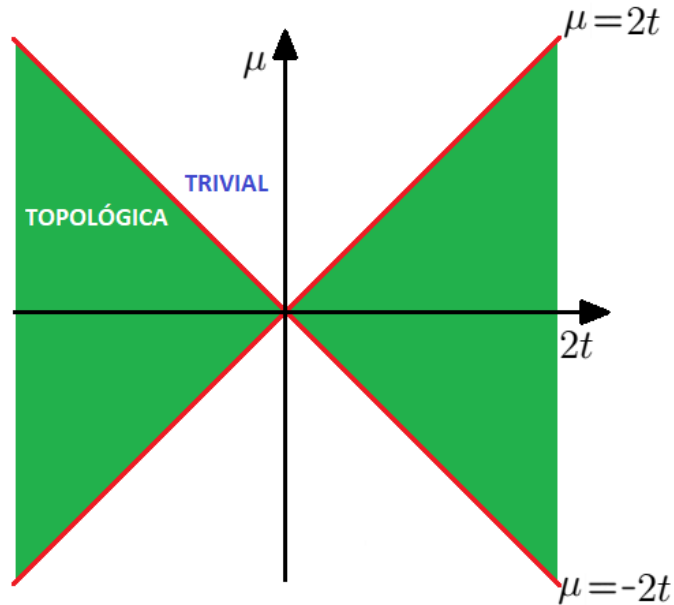


Figura 2.2: Transição de fases do estado trivial para o estado topológico para a cadeia de Kitaev. A região verde representa a fase topológica, que ocorre quando $|\mu| < |2t|$. A linha vermelha, que representa $\mu = \pm 2t$, mostra quando o gap se fecha, separando o estado trivial do estado topológico.

$\mathcal{M} = 1$, o estado é topologicamente trivial, enquanto é topológico para $\mathcal{M} = -1$. Isso implica que o estado em que $|\mu| > |2t|$ é trivial. O critério acima para determinar se o supercondutor é ou não um supercondutor topológico é chamado de critério de Kitaev.

Além disso, os férmions de Majorana espacialmente separados e localizados nas extremidades da cadeia representam modo zero de energia. Isso pode ser visto a partir da Eq. (2.5), na fase topológica quando $\Delta = t$ e $\mu = 0$, em que não há contribuição dos operadores $\gamma_{j,1}$ e $\gamma_{N,2}$ na energia.

Parte das análises feitas até então são encontradas na literatura, mas ainda não oferecem um entendimento completo da emergência de férmions de Majorana, seu controle e dependência de variáveis como a temperatura. A seguir, realizaremos novos cálculos que determinam o potencial efetivo dos férmions de Majorana, que

pode ser usado para o estudo de propriedades termodinâmicas do sistema, simulações computacionais, dentre outros.

2.3 Potencial Efetivo

Nosso trabalho consiste em encontrar o potencial efetivo dos férmions de Majorana emergentes no sistema, através da função de partição

$$V_{eff} = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}, \quad (2.16)$$

e obter resultados de algumas propriedades, como a equação de gap supercondutora, comparando-os a dados experimentais.

A estratégia usada será o cálculo da função de partição na representação do tempo complexo (para mais detalhes ver Apêndice A) [76]

$$\mathcal{Z} = \int [id\gamma^\dagger] [d\gamma] \exp \left[\int_0^\beta d\tau \sum_j \mathcal{L} \right], \quad (2.17)$$

onde a densidade de Lagrangiana do sistema, \mathcal{L} , é obtida por uma transformação da densidade de Hamiltoniana tal que

$$\mathcal{L} = \gamma_j^\dagger i \partial_t \gamma_j - \mathcal{H} = -\gamma_j^\dagger \partial_\tau \gamma_j - \mathcal{H}, \quad (2.18)$$

em que \mathcal{H} é a densidade de Hamiltoniana escrita na base de Majorana, sendo $H = \sum_j \mathcal{H}$. Além disso, γ_j é o campo de Nambu já definido na Eq. (2.12), que para o caso atual é escrito em termos dos operadores de criação e aniquilação de férmions de Majorana no espaço real. Temos também que $\beta = 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura, e τ é uma representação imaginária do tempo, $\tau = it$, cujos limites de integração são 0 e β .

A transformação entre as densidades de Hamiltoniana e Lagrangeana pode ser realizada, sem alteração do resultado, assumindo-as explicitamente tanto na base eletrônica quanto na base de Majorana. Com o propósito de se obter o resultado

da transformação na base de Majorana, por exemplo, podemos realizá-la de duas formas: a transformação da Eq. (2.18) pode ser feita diretamente, reescrevendo as densidades em termos dos operadores de Majorana; uma transformação na base eletrônica também pode ser realizada pela simples substituição dos operadores de Majorana explícitos na Eq. (2.18) pelos operadores eletrônicos, em que as densidades são escritas também em termos de operadores eletrônicos. No último caso, após realizada uma mudança de base do resultado para a base de Majorana, teremos a equivalência entre as duas transformações. Isso ocorre pois, com respeito à contribuição de derivada temporal, a mudança de base eletrônica para base de Majorana produz termos cruzados do tipo $\gamma_{n\sigma}^\dagger \partial_\tau \gamma_{m\sigma}$, em que $n, m = 1, 2$; $n \neq m$, mas que se cancelam. Esse resultado pode ser mostrado realizando-se a transformada de Fourier dos campos e resolvendo a subtração entre os termos existentes que se anulam. No espaço dos momentos, portanto, a função de partição pode ser reescrita como

$$\mathcal{Z} = \left(\prod_{n,p,\alpha} \int id\tilde{\gamma}_{\alpha,n,p}^\dagger d\tilde{\gamma}_{\alpha,n,p} \right) \exp \left[\sum_p \left(\sum_n i\tilde{\gamma}_{n,p}^\dagger \mathcal{D} \tilde{\gamma}_{n,p} + B_p \right) \right] \quad (2.19)$$

sendo \mathcal{D} e B_p obtidos de \mathcal{L} , com \mathcal{D} representando uma matriz e B_p termos independentes dos campos de Nambu $\tilde{\gamma}_{n,p}$, mas podendo depender de p .

A Hamiltoniana H referente à Eq. (2.12), utilizada para se obter a Lagrangeana, já foi obtida no espaço dos momentos. Portanto, para se escrever a densidade de Lagrangeana total no espaço dos momentos, basta calcularmos a transformada de Fourier da contribuição $\gamma_j \partial_\tau \gamma_j$, que é

$$\sum_j \int d\tau \gamma_j^\dagger \partial_\tau \gamma_j = i \sum_{n,p} \tilde{\gamma}_{n,p}^\dagger \omega_n \tilde{\gamma}, \quad (2.20)$$

e do termo constante, Δ^2 , que é um impulso no espaço dos momentos, cuja amplitude é o próprio valor da constante. Sendo assim, a Lagrangeana é escrita como

$$L = - \sum_p i \beta \gamma_{n,p}^\dagger \mathcal{D} \gamma_{n,p} - \beta \frac{\Delta^2}{g}, \quad (2.21)$$

com a matriz \mathcal{D} dada por

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} \omega_n & D^* \\ -D & \omega_n \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

O logaritmo natural da função de partição na representação do tempo complexo, com a Lagrangeana descrita acima é, portanto,

$$\ln \mathcal{Z} = \ln \left\{ \left(\prod_{n,p,\alpha} \int id\tilde{\gamma}_{\alpha,n,p}^\dagger d\tilde{\gamma}_{\alpha,n,p} \right) \exp \left[- \sum_{n,p} \beta i\gamma_{n,p}^\dagger \mathcal{D} \gamma_{n,p} \right] \right\} - \beta \frac{\Delta^2}{g}. \quad (2.23)$$

A integral da Eq. (2.23) é idêntica à da Eq. (2.19).

Para resolvermos a igualdade acima, vamos considerar inicialmente a integral Gaussiana

$$\int d\phi_1^\dagger d\phi_1 \dots d\phi_N^\dagger d\phi_N e^{\phi^\dagger \mathcal{A} \phi} = \det \mathcal{A}, \quad (2.24)$$

em que \mathcal{A} é uma matriz e ϕ_i uma variável de Grassmann. A integral que queremos resolver é semelhante à integral da Eq. (2.24), cujo resultado é bem conhecido [76]. Porém, os resultados somente serão iguais se $\tilde{\gamma}$ se comportar como uma variável de Grassmann, obedecendo

$$\{\phi_i, \phi_j\} = 0, \quad (2.25)$$

que é uma condição necessária para que a integral da Eq. (2.24) seja verdade, pois implica como caso particular que $(\phi_i)^2 = 0$. De fato, usando (2.10), pode-se mostrar que $\{\tilde{\gamma}_i, \tilde{\gamma}_j\} = 0$, ou seja, $(\tilde{\gamma}_i)^2 = 0$, que é necessária para se resolver a integral da função de partição análoga à (2.24). Além disso, as variáveis de integração $\tilde{\gamma}^\dagger$ e $\tilde{\gamma}$ são variáveis independentes, que são integradas individualmente, bem como as variáveis de Grassmann o são.

A integral em Eq. (2.23) pode, portanto, ser resolvida como uma integral Gaussiana que, no espaço contínuo, fica

$$\ln \mathcal{Z} = \int dp \sum_n \ln \left[\beta^2 (\omega_n^2 + |D|^2) \right] - \beta \frac{\Delta^2}{g}. \quad (2.26)$$

A soma sobre as frequência de Matsubara pode se vista no Apêndice B, cujo resultado mostra que

$$\sum_n \ln \left[\beta^2 (\omega_n^2 + |D|^2) \right] = 2 \left[\frac{\beta|D|}{2} + \ln \left(1 + e^{-\beta|D|} \right) \right]. \quad (2.27)$$

Finalmente, de (2.27) em (2.26), obtemos o potencial efetivo em função dos parâmetros relevantes, sendo

$$V_{eff} = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z} = -\frac{1}{\beta} \int dp \left[\beta|D| + 2 \ln \left(1 + e^{-\beta|D|} \right) \right] + \frac{\Delta^2}{g} \quad (2.28)$$

onde

$$|D| = \frac{1}{4} \sqrt{[\mu + 2t \cos(p)]^2 + [2\Delta \sin(p)]^2}. \quad (2.29)$$

Do potencial efetivo podemos verificar algumas propriedades do sistema. É possível compará-lo, por exemplo, com o potencial efetivo para férmions livres, onde existe um fator 2 multiplicativo, proveniente da natureza de spin- $\frac{1}{2}$ dos férmions. Aqui o fator não existe, uma vez que o sistema desconsidera spin, ou é spin-polarizado. Além disso, não vemos a contribuição de partículas e antipartículas, individualmente e explicitamente. Isso porque o que é relevante para o estado ser topologicamente trivial ou não é o módulo de μ com respeito à $2t$, como mencionado anteriormente, o que explica o outro fator 2 multiplicativo no logaritmo, justamente devido à essa ausência de contribuições distintas entre partículas e antipartículas. Adiante veremos no cálculo do número de elétrons que, como condição necessária para o estado topológico, deve existir uma mistura entre densidade eletrônica e de buracos no sistema, sendo que se houver somente densidade positiva (elétrons) ou densidade negativa (buracos), o sistema deixa de ser topológico e não há mais férmions de Majorana em modo zero e espacialmente separados. Isso também explica porque elétrons e buracos não são distintos no potencial efetivo para férmions de Majorana.

2.4 Diagrama de Fases Supercondutor e Número de Partículas

Com o potencial efetivo podemos calcular propriedades termodinâmicas do sistema. A dependência do parâmetro supercondutor com respeito as demais variáveis, por exemplo, pode ser obtido através do mínimo do potencial efetivo com respeito a Δ , isto é

$$\frac{\partial}{\partial \Delta} V_{eff} = 0, \quad (2.30)$$

que corresponde ao equilíbrio do sistema. Após uma manipulação algébrica do resultado da equação acima, é possível obter a seguinte equação de gap

$$\frac{1}{2} \int dp \frac{g \sin^2(p)}{|D|} \tanh\left(\frac{\beta|D|}{2}\right) = 1. \quad (2.31)$$

A integral acima pode ser resolvida introduzindo-se um cutoff de energia finito, Λ , que para o caso pode ser determinado pela energia do limite da primeira zona de Brillouin, cujo valor, a princípio, não precisa ser conhecido uma vez que as grandezas relevantes serão redefinidas em função desse cutoff. Vamos analisar a situação particular em que a fase do sistema é topológica, que ocorre quando $\Delta = t$ e $\mu = 0$. Nessa situação

$$|D| = \frac{1}{2}|\Delta| \quad (2.32)$$

e a equação de gap mostra a relação entre a temperatura e Δ

$$T' = \frac{|\Delta'|}{\operatorname{arctanh}(|\Delta'|)}, \quad (2.33)$$

onde foram definidos $T = T'\Delta_1/4$ e $\Delta = \Delta'\Delta_1$, em que $\Delta_1 = g \int dp \sin^2(p)/4$. O comportamento do gap supercondutor é coerente com o esperado e pode ser visto na Fig. 2.3: para um valor nulo de temperatura, o parâmetro supercondutor é máximo, e decresce à medida que a temperatura aumenta, até se tornar zero, o que mostra o desaparecimento da supercondutividade.

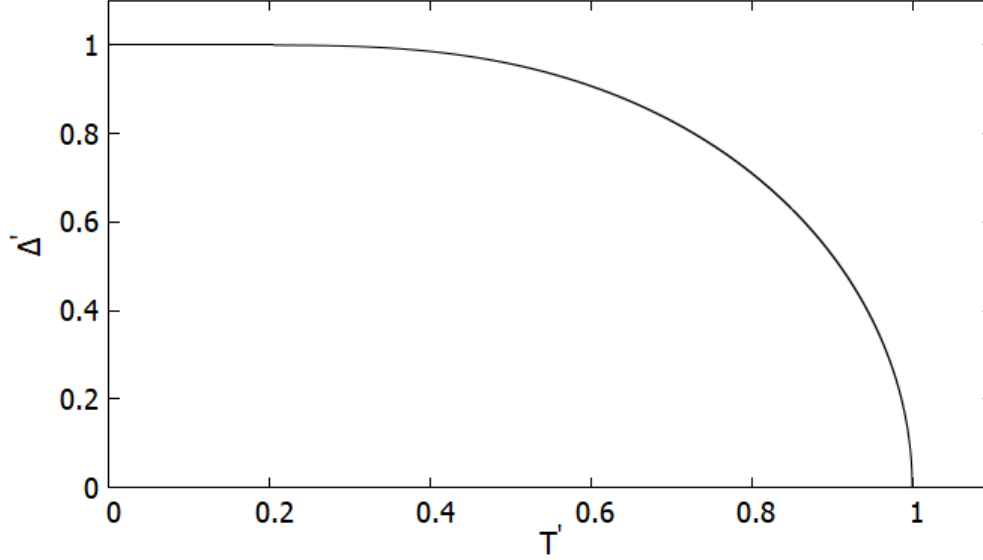


Figura 2.3: Δ' em função de T' .

Podemos também mostrar que para qualquer valor de g positivo e não nulo, nesse regime e em temperatura nula, sempre existe um parâmetro supercondutor crítico finito e positivo, parâmetro esse que é respectivo ao parâmetro supercondutor na condição de equilíbrio do sistema. Isso implica que, nessas condições, o sistema é sempre supercondutor. Retornando à Eq. (2.31), para temperatura nula, ou $\beta \rightarrow \infty$, temos

$$\frac{1}{2} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left[\int dp \frac{g \sin^2(p)}{|D|} \tanh \left(\frac{\beta |D|}{2} \right) \right] = \frac{1}{2} \int dp \frac{g \sin^2(p)}{|D|}. \quad (2.34)$$

Como assumimos para o estado topológico $|D| = |\Delta|/2$, temos então que

$$\frac{1}{2} \int dp \frac{g \sin^2(p)}{|D|} = \frac{g}{|\Delta|} \int dp \sin^2(p), \quad (2.35)$$

que leva ao parâmetro supercondutor crítico, Δ_0 , quando a Eq. (2.31) satisfaz

$$\begin{aligned} \frac{g}{|\Delta_0|} \int dp \sin^2(p) &= 1 \\ \Rightarrow |\Delta_0| &= g \left(\Lambda - \frac{1}{2} \sin(2\Lambda) \right) / 2, \end{aligned} \quad (2.36)$$

que é sempre positivo e finito para Λ finito, o que é verdade pois, como já mencionado, o mesmo é restrito a primeira zona de Brillouin. Esse parâmetro é igual à Δ_0 definido anteriormente. Seu valor deve permanecer finito para uma interação eletrônica g positiva e não nula. A transição da fase quântica para $g = g_c$ não nulo, abaixo da qual o sistema deixa de ser supercondutor, apenas ocorre se $t \neq \Delta$.

Agora calcularemos o número de partículas como a derivada do potencial efetivo em função do potencial químico, em que [76]

$$N = -\frac{\partial V_{eff}}{\partial \mu}. \quad (2.37)$$

No caso, o número de partículas é relacionado ao número do elétrons, ou buracos, uma vez que o potencial químico corresponde aos mesmos. Derivando então o potencial efetivo com respeito ao potencial químico, temos

$$N_e = \frac{1}{16} \int dp \frac{\mu + 2t \cos(p)}{|D|} \tanh\left(\frac{\beta|D|}{2}\right), \quad (2.38)$$

cujo argumento da integração pode ser interpretado como a densidade de número de partículas no espaço dos momentos.

À temperatura nula, ou $\beta \rightarrow \infty$, a tangente hiperbólica tende a 1, e o número de elétrons é

$$N_e = \frac{1}{16} \int dp \frac{\mu + 2t \cos(p)}{|D|}. \quad (2.39)$$

Se $|\mu| > |2t|$, como já foi discutido, o sistema se encontra no estado trivial. Caso $\mu > 2t$, para μ e t positivos, a densidade eletrônica é sempre positiva e não há densidade negativa de elétrons, como pode ser visto na Fig. 2.4, que mostra quando a densidade passa a ter somente valores positivos, para $t = 1$ e $\mu = 2$. Na figura, todas as curvas assumem $\Delta = 1$. Por outro lado, Caso $\mu < 2t$, para μ e t negativos, o argumento será sempre negativo, que na figura se refere à $t = -1$ e $\mu = -2$. Aqui, valores negativos de densidade eletrônica significam uma densidade positiva de buracos em relação ao nível de Fermi. Ou seja, para o estado trivial não

há mistura entre elétrons e buracos no espaço dos momentos. Em contrapartida, se $|\mu| < |2t|$, que implica o sistema no estado topológico, a densidade de partículas oscila entre valores positivos e negativos ao longo do espaço dos momentos. Isso sugere que, para emergência de modo zero de férmions de Majorana, devem haver buracos e elétrons, simultaneamente, no sistema. Na Fig. 2.4, essa situação está representada para $\mu = 0$ e $t = 1$. Esse resultado é coerente uma vez que férmions de Majorana são provenientes de superposição de estados eletrônicos e de buracos, como já foi discutido, e mostra uma forma de determinar se o sistema se encontra, ou não, no estado topológico.

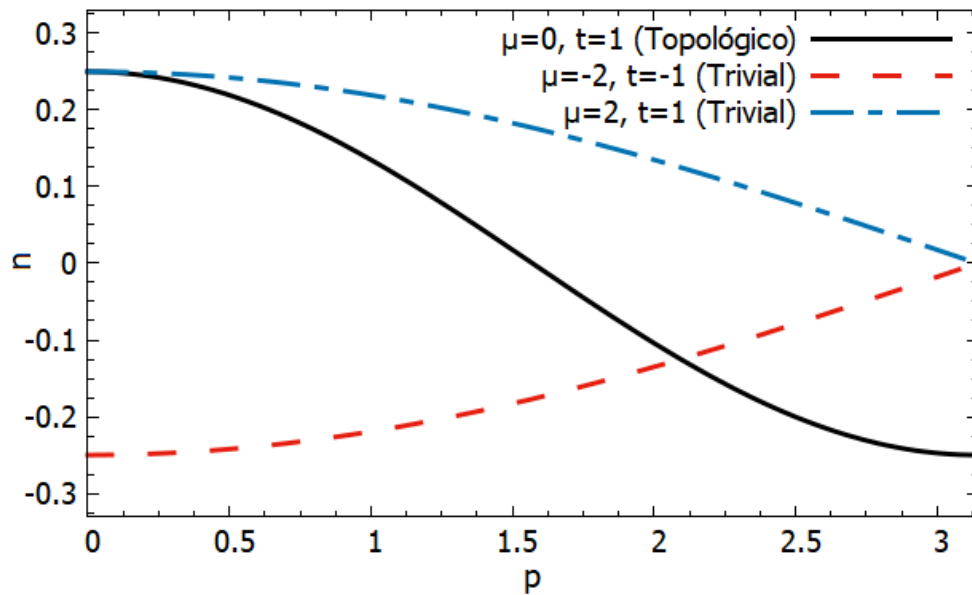


Figura 2.4: Densidade de número de partículas no espaço dos momentos em função de p para $\Delta = 1$, e diferentes valores de μ e t .

Nesse capítulo calculamos o potencial efetivo para Férmions de Majorana emergentes na cadeia de Kitaev, sua equação de *gap* e o número de partículas que mostra a relação da densidade do números de partículas com o estado topologicamente não trivial. Estes resultados foram desenvolvidos durante o curso de Doutorado em Física Aplicada da Universidade Federal de Viçosa e publicados na revista *Physics*

Letters A pelos autores A. W. Teixeira, V. L. Carvalho-Santos e J .M. Fonseca, sendo partes deste capítulo traduções livres desse artigo [77].

Capítulo 3

Supercondutividade Induzida em Isolantes Topológicos

3.1 Introdução

Isolantes topológicos são materiais protegidos topologicamente, caracterizados por um *gap* isolante no seu interior enquanto apresentam estados condutores em sua superfície. Tais estados se mantêm mesmo na presença de defeitos e são protegidos por simetria de reversão temporal. Além disso, o forte acoplamento spin-órbita de um isolante topológico em duas dimensões gera, em sua superfície, um par de estados com propagação de spins em direções opostas. Quando o potencial químico se encontra dentro do *gap* de energia do interior do material, o estado da borda pode ser analisado como um sistema em uma dimensão que contém um número ímpar de pontos de Fermi no lado direito da primeira zona de Brillouin. A Fig. 3.1(b) mostra a relação de dispersão para o IT, e para o mesmo na presença de dois isolantes ferromagnéticos, com supercondutividade induzida, como na Fig. 3.1(a). As linhas vermelha e amarela são relativas ao par de estados de spins da borda do IT, enquanto as curvas pretas representam um *gap* de energia produzido pela presença de dois materiais ferromagnéticos, que quebram a simetria de reversão temporal no IT. Quando o *gap* é aberto, caso o potencial químico se encontre acima da banda superior, próximo ao seu mínimo, e Δ seja menor que as outras grandezas,

o sistema é descrito pelo modelo de Kitaev para um supercondutor de onda p 1D sem spin, no limite de baixa densidade [78]. Isso faz com que sua borda, analisada como se fosse um sistema 1D, obedeça ao critério de Kitaev. Sendo assim, se um isolante topológico 2D apresentar ordem supercondutora em sua superfície, esta seria caracterizada como supercondutividade topológica [79, 80].

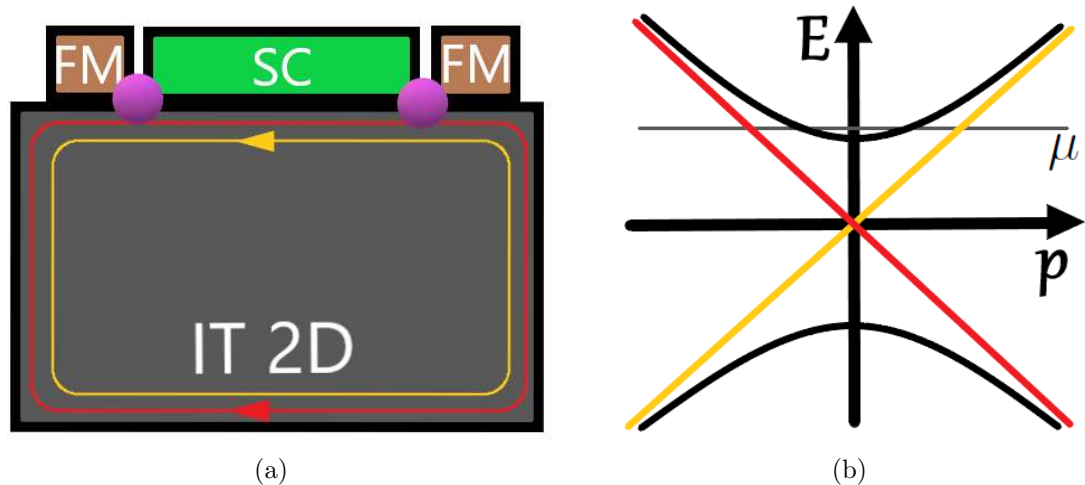


Figura 3.1: (a) IT bidimensional com supercondutividade induzida por efeito de proximidade. A presença dos materiais ferromagnéticos proporciona condições para a emergência de férmions de Majorana. (b) Relação de dispersão para o estado de borda. As linhas vermelha e amarela representam os estados para o IT. A presença do campo magnético abre um *gap*, representado pelas curvas pretas.

Fu e Kane propuseram que, ao se aproximar um filme supercondutor da superfície de um isolante topológico 3D, supercondutividade é induzida nessa superfície [73]. Assim como em um supercondutor 2D, espera-se que modos zero de Majorana se formem espacialmente separados. As propriedades da supercondutividade induzida, como a forma do parâmetro supercondutor, são herdadas do supercondutor original.

Esse sistema é representado na Fig. 1.2, cuja Hamiltoniana simplista que abrange propriedades essenciais do IT e do supercondutor, e que descreve a su-

percondutividade induzida, é [8,10]

$$\begin{aligned}
 H = \int dr dr' \left\{ & -\frac{|\Delta(r, r')|^2}{g} + c_{\uparrow r}^\dagger \Delta(r, r') c_{\downarrow r'}^\dagger - c_{\uparrow r} \Delta^*(r, r') c_{\downarrow r'} \right. \\
 & + \frac{\delta(r - r')}{2} \left[c_{\downarrow r'}^\dagger p_+ c_{\uparrow r} + c_{\uparrow r} p_+ c_{\downarrow r'}^\dagger + c_{\uparrow r}^\dagger p_- c_{\downarrow r'} + c_{\downarrow r'} p_- c_{\uparrow r}^\dagger \right. \\
 & \left. \left. - 2 \sum_{\sigma} \mu \left(c_{\sigma}^\dagger c_{\sigma} - \frac{1}{2} \right) \right] \right\}, \quad (3.1)
 \end{aligned}$$

em que o operador $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$ e o parâmetro supercondutor complexo, Δ , dependem de r e r' , explicitamente. O parâmetro supercondutor pode ser representado por um vórtice, sendo que férmions de Majorana emergentes são ligados ao mesmo.

Novamente, queremos entender como o sistema se comporta em função da temperatura, e quais fenômenos estão envolvidos na indução de supercondutividade no IT. Para isso, usaremos técnicas análogas às usadas no capítulo anterior a fim de conhecer o potencial efetivo do sistema.

3.2 Potencial Efetivo

De forma análoga ao Capítulo 2, queremos calcular a função de partição dada pela Eq. (2.19) e, então, encontrar o potencial efetivo. Com essa finalidade, realizamos a transformação dos operadores eletrônicos da Eq. (2.3) e escrevemos a

Hamiltoniana em termos dos campos de Majorana

$$\begin{aligned}
H &= \int dr dr' \gamma^\dagger \hat{H}_{BdG} \gamma - \frac{|\Delta(r,r')|^2}{g}; \\
\gamma_{r,r'}^\dagger &= \begin{pmatrix} \gamma_{1\uparrow,r}^\dagger & \gamma_{2\uparrow,r}^\dagger & \gamma_{1\downarrow,r'}^\dagger & \gamma_{2\downarrow,r'}^\dagger \end{pmatrix}, \\
\hat{H}_{BdG} &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \delta(r-r')i\bar{\mu} & \bar{\Delta} + \delta(r-r')\bar{p} \\ \bar{\Delta}^* + \delta(r-r')\bar{p}^* & \delta(r-r')i\bar{\mu} \end{pmatrix}, \\
\bar{\mu} &= \begin{pmatrix} 0 & -\mu \\ \mu & 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{p} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} p_+ + p_- & i(p_- - p_+) \\ i(p_+ - p_-) & p_+ + p_- \end{pmatrix}, \\
\bar{\Delta} &= \begin{pmatrix} \Delta(r,r') & -i\Delta(r,r') \\ -i\Delta(r,r') & -\Delta(r,r') \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{3.2}$$

em que definimos o campo de Majorana $\gamma_{r,r'}$ no espaço real.

Porém, pode-se perceber que nesse caso a Hamiltoniana depende tanto de r quanto de r' . Logo, devemos fazer uma generalização da função de partição (2.19) tal que

$$\mathcal{Z} = \left(\prod_{n,p,p',\alpha} \int id\tilde{\gamma}_{\alpha,n,p,p'}^\dagger d\tilde{\gamma}_{\alpha,n,p,p'} \right) \exp \left[\sum_{p,p'} \left(\sum_n i\tilde{\gamma}_{n,p,p'}^\dagger \mathcal{D}\tilde{\gamma}_{n,p,p'} + B_{p,p'} \right) \right], \tag{3.3}$$

que agora depende tanto de p quanto de p' , e

$$\tilde{\gamma}_{n,p,p'} = \left(\tilde{\gamma}_{1,\uparrow,n,p} \tilde{\gamma}_{2,\uparrow,n,p} \tilde{\gamma}_{1,\downarrow,n,p'} \tilde{\gamma}_{2,\downarrow,n,p'} \right)^T. \tag{3.4}$$

Posteriormente, realizamos a transformada de Fourier dos campos de Majorana, seguindo (2.7). Aqui, temos dois pontos importantes: quando feita a transformada de Fourier, os operadores p_\pm atuam, e assim se tornam números; Como agora o parâmetro supercondutor depende da posição, sua transformada de Fourier também deve ser realizada, e será definida como

$$\Delta(r,r') = \frac{1}{V} \sum_{p,p'} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} + \mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}')} \tilde{\Delta}_{p,p'}. \tag{3.5}$$

em que a transformada de Fourier de r e r' foram feitas individualmente, por se tratarem de variáveis independentes.

Por último, para obtermos a Lagrangeana e determinarmos tanto \mathcal{D}' quanto $\sum_{p,p'} B_{p,p'}$ na Eq. (2.19), devemos considerar a contribuição $\gamma_r^\dagger \partial_\tau \gamma_r$ e sua transformada de Fourier

$$\int_0^\beta d\tau \int dr \gamma_{j\sigma r}^\dagger \partial_\tau \gamma_{j\sigma r} = i \sum_n \sum_{p,p'} \tilde{\gamma}_{j\sigma,n,p}^\dagger \delta_{p,p'} \beta \omega_n \tilde{\gamma}_{j\sigma,n,p'}, \quad (3.6)$$

o que leva à uma matriz \mathcal{D}' que obedece

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &= \frac{\beta \delta_{p,p'}}{4} \begin{pmatrix} \mathcal{W} + \bar{\mu} & \mathcal{P}'_- - \bar{\Delta}' \\ \mathcal{P}'_+ + \bar{\Delta}'^* & \mathcal{W} + \bar{\mu} \end{pmatrix}; \\ \mathcal{W} &= 2 \begin{pmatrix} \omega_n & 0 \\ 0 & \omega_n \end{pmatrix}, \quad \mathcal{P}'_\pm = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -i(p_\pm + p'_\pm) & (p_\pm + p'_\pm) \\ -(p_\pm + p'_\pm) & -i(p_\pm + p'_\pm) \end{pmatrix}, \\ \bar{\Delta}' &= \frac{1}{\delta_{p,p'}} \begin{pmatrix} i\tilde{\Delta}(p, -p') & \tilde{\Delta}(p, -p') \\ -\tilde{\Delta}(p, -p') & i\tilde{\Delta}(p, -p') \end{pmatrix}, \quad \bar{\mu} = \begin{pmatrix} 0 & -\mu \\ \mu & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde, como foi mencionado, p_\pm não são mais operadores e todas as variáveis dependem dos momentos, e não mais das posições. Já para a contribuição $\sum_{p,p'} B_{p,p'}$, temos

$$\sum_{p,p'} B_{p,p'} = - \sum_{p,p'} \beta \frac{|\Delta(p, -p')|^2}{g}. \quad (3.8)$$

Já o fator 2 multiplicando as componentes ω_n de \mathcal{W} surge pois partículas e antipartículas para férmions de Majorana são equivalentes. A Eq. 2.18 descrita para férmions livres leva em consideração tanto a contribuição de partículas quanto de antipartículas no termo de derivada temporal [76]. Porém, no caso atual, a combinação dos elementos das matrizes $\tilde{\gamma}_{n,p,p'}^\dagger$ e $\tilde{\gamma}_{n,p,p'}$ somente leva em consideração contribuições de partículas ou de antipartículas. Como partículas de Majorana são suas próprias antipartículas, eliminando a necessidade de escrever as duas contribuições explicitamente, já que são equivalentes, basta duplicar os termos já existentes.

Nesse contexto, o problema depende da forma do parâmetro supercondutor no espaço dos momentos. Vamos considerar um caso geral, em que $\tilde{\Delta}(p, -p')$ é genericamente escrito como

$$\tilde{\Delta}(p, -p') = i \left| \tilde{\Delta} \right| f(p) \delta_{p,p'}, \quad (3.9)$$

tal que $\tilde{\Delta}$ sem a dependência explícita de p e p' é uma constante e $f(p)$ é complexa. Dessa forma, é possível realizarmos a soma em p' , o que leva à uma nova matriz \mathcal{D} da Eq. (2.19) obedecendo

$$\mathcal{D} = \frac{\beta}{4} \begin{pmatrix} \mathcal{W} + \bar{\mu} & \mathcal{P}_- - \bar{\Delta}'' \\ \mathcal{P}_+ + \bar{\Delta}''^* & \mathcal{W} + \bar{\mu} \end{pmatrix};$$

$$\mathcal{P}_\pm = \begin{pmatrix} -ip_\pm & p_\pm \\ -p_\pm & -ip_\pm \end{pmatrix}, \quad \bar{\Delta}'' = \begin{pmatrix} -\left| \tilde{\Delta} \right| f(p) & i \left| \tilde{\Delta} \right| f(p) \\ i \left| \tilde{\Delta} \right| f(p) & \left| \tilde{\Delta} \right| f(p) \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

e

$$\sum_{p,p'} B_{p,p'} = - \sum_p \beta \left| \tilde{\Delta} \right|^2 |f(p)|^2. \quad (3.11)$$

Com as Eqs. (3.10) e (3.11) é possível escrever a função de partição (2.19) para o sistema atual. Novamente, como os campos de Majorana, no espaço dos momentos, se comportam como variáveis de Grassmann, a integral pode ser resolvida como uma integral Gaussiana, que depende do determinante da matriz \mathcal{D} ,

$$\det \mathcal{D} = \left(\frac{\beta}{4} \right)^4 \left[(\mu^2 + 4\omega_n^2) (4 \left| \tilde{\Delta} \right|^2 |f(p)|^2 + \mu^2 + 4\omega_n^2) - 4|p|^2 (\mu + 2i\omega_n)^2 \right]. \quad (3.12)$$

Para o caso particular em que $\mu = 0$, por exemplo, temos

$$\det \mathcal{D} = \omega_n^2 \left(\frac{\beta}{2} \right)^4 \left(|p|^2 + \left| \tilde{\Delta} \right|^2 |f(p)|^2 + \omega_n^2 \right), \quad (3.13)$$

levando à um \ln da função de partição da forma

$$\ln \mathcal{Z} = \sum_p \left\{ \sum_n \ln \left\{ \frac{\beta^2 \omega_n^2}{16} \right\} + \sum_n \ln \left\{ \beta^2 \left(|p|^2 + |\tilde{\Delta}|^2 |f(p)|^2 + \omega_n^2 \right) \right\} - \frac{\beta |\tilde{\Delta}|^2 |f(p)|^2}{g} \right\}. \quad (3.14)$$

A soma característica sobre as frequências de Matsubara já foi feita anteriormente para a cadeia de Kitaev e se encontra no Apêndice B, que resulta, a menos de termos constantes, em

$$\sum_n \ln \left[\beta^2 (\omega_n^2 + k^2) \right] = 2 \left[\frac{\beta k}{2} + \ln \left(1 + e^{-\beta k} \right) \right]. \quad (3.15)$$

Assim, para a primeira soma onde $k = 0$, o resultado é uma constante irrelevante para os cálculos. Já a segunda soma corresponde à $k = \sqrt{|p|^2 + |\tilde{\Delta}|^2 |f(p)|^2}$, e deve ser considerada.

Isto é, o potencial efetivo após a soma em n , e levando a soma em p para o contínuo, fica

$$V_{eff} = \int dp \left\{ \frac{|\tilde{\Delta}|^2 |f(p)|^2}{g} - \frac{2}{\beta} \ln \left[1 + e^{-\beta \sqrt{|p|^2 + |\tilde{\Delta}|^2 |f(p)|^2}} \right] - \sqrt{|p|^2 + |\tilde{\Delta}|^2 |f(p)|^2} \right\}. \quad (3.16)$$

Introduzido um cutoff de energia Λ , que é considerado na primeira zona de Brillouin, e escrevendo a integral em coordenadas polares, o potencial efetivo acima

fica, finalmente,

$$V_{eff} = 2\pi \int_0^\Lambda dp p \left\{ \frac{|\tilde{\Delta}|^2 |f(p)|^2}{g} - \frac{2}{\beta} \ln \left[1 + e^{-\beta \sqrt{p^2 + |\tilde{\Delta}|^2 |f(p)|^2}} \right] - \sqrt{p^2 + |\tilde{\Delta}|^2 |f(p)|^2} \right\}. \quad (3.17)$$

Esse resultado corresponde a um caso geral, para qualquer parâmetro supercondutor que possa ser escrito como na Eq. (3.9) e $\mu = 0$. Observe que foi assumido uma integral bidimensional em coordenadas polares, sobre a primeira zona de Brillouin, o que implica que esta deve ser aproximada a uma circunferência. De fato, vários sistemas de isolantes topológicos obedecem a esse critério e podem sofrer tal aproximação [79, 80]. Adiante, iremos calcular o potencial efetivo e algumas propriedades do sistema assumindo algumas formas de parâmetro supercondutor, como onda s e onda p .

3.3 Onda s ; $\Delta(r, r') = |\Delta| \delta(r - r')$

Como foi definido, $\tilde{\Delta}(p, -p')$ é a transformada de Fourier do parâmetro $\Delta(r, r')$, sendo

$$\tilde{\Delta}(p, -p') = \frac{1}{V} \int dr e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - \mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}')} \Delta(r, r'). \quad (3.18)$$

Se supormos o parâmetro supercondutor respectivo à onda s , $\Delta(r, r') = |\Delta| \delta(r - r')$, então a transformada de Fourier de $\Delta(r, r')$ seria

$$\tilde{\Delta}(p, -p') = |\Delta| \delta_{p,p'}, \quad (3.19)$$

o que implica, para onda s , $f(p) = -i$ na Eq. (3.17), sendo o potencial efetivo nesse caso

$$V_{eff} = -2\pi \int_0^\Lambda dp p \left\{ \frac{2}{\beta} \ln \left[1 + e^{-\beta k} \right] + k \right\} + \frac{\pi \Lambda^2 |\tilde{\Delta}|^2}{g}, \quad (3.20)$$

com $k = \sqrt{p^2 + |\tilde{\Delta}|^2} |f(p)|^2$.

Verificaremos se o potencial efetivo gera um resultado esperado calculando o parâmetro supercondutor em função da temperatura. Para isso, devemos encontrar o equilíbrio do potencial efetivo como sendo

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\Delta}} V_{eff} = 0. \quad (3.21)$$

A derivada primeira do potencial efetivo com respeito ao parâmetro supercondutor é

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\Delta}} V_{eff} = -2\pi \int_0^\Lambda dp p \frac{\partial k}{\partial \tilde{\Delta}} \left[\tanh \left(\frac{\beta k}{2} \right) \right] + 2 \frac{\pi \Lambda^2 |\tilde{\Delta}|}{g}. \quad (3.22)$$

Porém, como

$$\frac{\partial k}{\partial \tilde{\Delta}} = \frac{\partial}{\partial \tilde{\Delta}} \sqrt{|\tilde{\Delta}|^2 + p^2} = \frac{|\tilde{\Delta}|}{\sqrt{|\tilde{\Delta}|^2 + p^2}}, \quad (3.23)$$

então

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\Delta}} V_{eff} = 2\pi |\tilde{\Delta}| \Lambda^2 \left\{ \frac{1}{g} - \frac{1}{\Lambda^2} \int_0^\Lambda dp \frac{p}{\sqrt{|\tilde{\Delta}|^2 + p^2}} \tanh \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{|\tilde{\Delta}|^2 + p^2} \right) \right\}, \quad (3.24)$$

ou ainda, fazendo $x = p^2$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\Delta}} V_{eff} = 2\pi |\tilde{\Delta}| \Lambda^2 \left\{ \frac{1}{g} - \frac{1}{2\Lambda^2} \int_0^{\Lambda^2} dx \frac{1}{\sqrt{|\tilde{\Delta}|^2 + x}} \tanh \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{|\tilde{\Delta}|^2 + x} \right) \right\}. \quad (3.25)$$

A equação acima está em bom acordo com resultados prévios que descrevem o comportamento de $\tilde{\Delta}$ em um sistema eletrônico de Dirac supercondutor quasi-2D [81]. No mínimo, a equação leva à equação de gap BCS, o que ocorre por termos

tratado o caso de onda s [71]. Nessa situação, o gap supercondutor é máximo em $T = 0$ e vai a zero à medida que a temperatura aumenta. Além disso, em $T = 0$, mostra que há uma transição de fase do estado normal para o estado supercondutor em função do parâmetro g , análogo ao caso de onda p que será deduzido adiante. Apesar do potencial efetivo ser respectivo a férmions de Majorana, o resultado encontrado para o *gap* supercondutor é esperado uma vez que o trabalho consiste na análise de um sistema eletrônico, com $\tilde{\Delta}$ sendo o mesmo parâmetro em ambos os potenciais efetivos. Porém, os potenciais efetivos dos dois sistemas são diferentes, justificando os cálculos.

A equivalência entre as equações de *gap* atual e aquela para sistemas eletrônicos de Dirac supercondutor quasi-2D é interessante, pois o termo de interação supercondutora obtida para o último também é obtida como uma interação efetiva para redes de elétrons de Dirac usando o modelo de Heisenberg-Kondo antiferromagnético, ou modelo de spin-férmion. Esse modelo tem sido estudado como candidato para explicar o surgimento de uma fase supercondutora em cupratos supercondutores de alta temperatura crítica, à medida que o sistema é dopado com elétrons ou buracos [82–84]. O fato de as equações de *gap* serem equivalentes e ambos os sistemas serem (*quasi*-)bidimensionais sugere a emergência natural de férmions de Majorana nos planos de CuO nos cupratos. Além disso, o parâmetro supercondutor dos cupratos possui uma forma característica que também pode contribuir para a fenomenologia. O resultado acima, portanto, mostra um novo caminho a ser investigado, que será abordado no próximo capítulo.

3.4 Onda p ; $\tilde{\Delta}(p, -p') = i \left| \tilde{\Delta} \right| (p_x + ip_y) \delta_{p,p'}$

Agora, assumiremos o caso em que $\tilde{\Delta}(p, -p') = i \left| \tilde{\Delta} \right| (p_x + ip_y) \delta_{p,p'}$, com $\left| \tilde{\Delta} \right|$ constante, que deve representar um sistema com onda p . Nesse caso $f(p) = (p_x + ip_y)$ e o potencial efetivo da Eq. (3.17) fica

$$V_{eff} = 2\pi \int_0^\Lambda dp p \left\{ \frac{|\tilde{\Delta}|^2 p^2}{g} - \frac{2}{\beta} \ln \left[1 + e^{-\beta p \sqrt{1+|\tilde{\Delta}|^2}} \right] - p \sqrt{1+|\tilde{\Delta}|^2} \right\}. \quad (3.26)$$

3.4.1 Análise em $T = 0$

Para $T \rightarrow 0$, ou $\beta \rightarrow \infty$, o segundo termo da integral se anula, pois o termo $1/\beta$ tende a zero, enquanto a exponencial tende a 0, sendo que seu argumento vai a $-\infty$, fazendo com que o logaritmo natural seja constante. Assim, o potencial efetivo é

$$V_{eff} = 2\pi \int_0^\Lambda dp p \left(\frac{|\tilde{\Delta}|^2 p^2}{g} - p \sqrt{1+|\tilde{\Delta}|^2} \right). \quad (3.27)$$

Como anteriormente, o mínimo do potencial efetivo com respeito ao parâmetro supercondutor nos dá a equação de gap. Com ela, podemos encontrar o valor respectivo para o parâmetro $|\tilde{\Delta}| = |\tilde{\Delta}_0|$ que condiz à condição de equilíbrio do sistema para temperatura nula. Derivando o potencial efetivo temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tilde{\Delta}} [V_{eff}]_{|\tilde{\Delta}_0|} &= 2\pi |\tilde{\Delta}_0| \left(\frac{\Lambda^4}{2g} - \frac{\Lambda^3}{3\sqrt{1+|\tilde{\Delta}_0|^2}} \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.28)$$

que é verdade se $|\tilde{\Delta}| = 0$ ou se

$$\begin{aligned} \frac{\Lambda^4}{2g} - \frac{\Lambda^3}{3\sqrt{1+|\tilde{\Delta}_0|^2}} &= 0 \\ \Rightarrow |\tilde{\Delta}_0| &= \sqrt{\left(\frac{2g}{3\Lambda}\right)^2 - 1}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Encontramos então um valor crítico de $g = g_c = 3\Lambda/2$ no qual ocorre uma transição de fase do estado normal para o estado supercondutor, sendo que

$$|\tilde{\Delta}_0| = \begin{cases} 0 & \text{se } g \leq 3\Lambda/2 \\ \sqrt{\left(\frac{2g}{3\Lambda}\right)^2 - 1} & \text{se } g > 3\Lambda/2 \end{cases} . \quad (3.30)$$

O parâmetro supercondutor $|\tilde{\Delta}_0|$ determina se o sistema é ou não supercondutor em temperatura nula. Se o parâmetro for zero, o *gap* supercondutor é zero e o sistema se encontra no estado normal. Caso contrário, o sistema é supercondutor. Quando $g < g_c$, portanto, o sistema se encontra no estado normal e para $g > g_c$ no estado supercondutor, caracterizando a transição de fase citada em um valor crítico de $g = g_c$.

Além disso, esse é de fato um ponto de mínimo. Para demonstrar, calcularemos a derivada segunda do potencial efetivo com respeito ao parâmetro supercondutor, que é

$$\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\Delta}^2} V_{eff} = \frac{2\pi\Lambda^3}{3} \left(\frac{3\Lambda}{2g} - \frac{1}{\left(1 + |\tilde{\Delta}|^2\right)^{\frac{3}{2}}} \right). \quad (3.31)$$

Se $g \leq 3\Lambda/2$, que ocorre quando $\tilde{\Delta} = 0$, a expressão se torna

$$\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\Delta}^2} [V_{eff}]_{\tilde{\Delta}=0} = \frac{2\pi\Lambda^3}{3} \left(\frac{3\Lambda}{2g} - 1 \right) > 0, \quad (3.32)$$

que é côncava para cima, ou um ponto de mínimo. Por outro lado, se $g > 3\Lambda/2$, ou seja, $\tilde{\Delta} = \sqrt{(2g/3\Lambda)^2 - 1}$, então

$$\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\Delta}^2} [V_{eff}]_{\tilde{\Delta}=\sqrt{\left(\frac{2g}{3\Lambda}\right)^2 - 1}} = \frac{2\pi\Lambda^3}{3} \left(\frac{3\Lambda}{2g} - \left(\frac{3\Lambda}{2g}\right)^3 \right) > 0, \quad (3.33)$$

que também é um ponto de mínimo.

Como discutido, esse resultado mostra que, à temperatura nula, se a interação atrativa g for suficientemente grande em relação à magnitude do produto de uma constante com um cutoff de energia ($g > g_c$), que está relacionado com a primeira zona de Brillouin do IT, o sistema será supercondutor. Como o fenômeno depende da comparação entre a intensidade de g e Λ , que são propriedades dos materiais envolvidos (supercondutor e IT), em que para determinados valores dos mesmos não há supercondutividade, a Eq. (3.30) determina as condições em que supercondutividade será ou não induzida. A constante g mede a interação entre elétrons ligados no supercondutor, que não se mantêm no IT caso não sejam fortes suficiente.

A fim de medir a magnitude de g_c , devemos multiplicar p_{\pm} na Eq. 3.1 por $\hbar v_f$, em que v_f corresponde à velocidade de Fermi dos portadores de carga na superfície do IT. Desse modo, obtemos $g_c = 3\hbar v_f \Lambda / 2$, evidenciando que g_c depende somente de parâmetros do IT, uma vez que $\Lambda = \pi/a$ está relacionado à primeira zona de Brillouin. Para o material Bi_2Se_3 , por exemplo, temos que $\hbar v_f = 2.87 \text{ eV}\text{\AA}$ e o maior parâmetro de rede é $a = 30.5 \text{ \AA}$ [80, 85]. Obtemos, portanto, $g_c = 0.44 \text{ eV}$. Por outro lado, podemos calcular g_{sc} usando [86]

$$g_{sc} \approx -\frac{1}{N(0) \ln\left(\frac{T_c}{\Theta_D}\right)}, \quad (3.34)$$

onde T_c é a temperatura crítica de transição do supercondutor, Θ_D a temperatura de Debye e $N(0)$ a densidade de estados, também do supercondutor. Se considerarmos, por exemplo, os parâmetros do P_b , que são $T_c = 7.19 \text{ K}$, $\Theta_D = 105 \text{ K}$ e $N(0) = 0.49 \text{ estados/eV}$ [86, 87], obtemos $g_{sc} \approx 0.76 \text{ eV}$. Como para esse caso $g_{sc} > g_c$, é esperado que P_b induza supercondutividade em Bi_2Se_3 . De fato, esse resultado corrobora com dados experimentais em que supercondutividade induzida foi observada para o caso acima [88, 89].

3.4.2 Análise em Temperatura finita

Para temperatura não nula, o segundo termo da integral da Eq. (3.26) deve ser considerado. Sua derivada primeira, portanto, com respeito ao parâmetro supercondutor é

$$-\frac{2}{\beta} \frac{\partial}{\partial \tilde{\Delta}} \ln \left[1 + e^{-\beta p \sqrt{1+|\tilde{\Delta}|^2}} \right] = \frac{2}{\beta} \frac{\beta p e^{-\beta p \sqrt{1+|\tilde{\Delta}|^2}}}{1 + e^{-\beta p \sqrt{1+|\tilde{\Delta}|^2}}} \frac{|\tilde{\Delta}|}{\sqrt{1+|\tilde{\Delta}|^2}}, \quad (3.35)$$

o que leva à uma derivada do potencial efetivo, usando Eq. (3.28), da forma

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\Delta}} V_{eff} = 2\pi |\tilde{\Delta}| \left[\frac{\Lambda^4}{2g} - \frac{1}{\sqrt{1+|\tilde{\Delta}|^2}} \int_0^\Lambda dp p^2 \tanh \left(\frac{\beta p}{2} \sqrt{1+|\tilde{\Delta}|^2} \right) \right]. \quad (3.36)$$

No limite de $\beta \rightarrow \infty$, a tangente hiperbólica vai a 1 e a derivada do potencial efetivo, obviamente, é igual à calculada anteriormente, para $T = 0$. Como para o mínimo a derivada primeira deve ser igual à zero, obtemos a seguinte equação de *gap*

$$\frac{2g}{\Lambda^4 \sqrt{1+|\tilde{\Delta}|^2}} \int_0^\Lambda dp p^2 \tanh \left(\frac{\beta p}{2} \sqrt{1+|\tilde{\Delta}|^2} \right) = 1. \quad (3.37)$$

A integral em p pode ser resolvida analiticamente e gráficos para a equação de *gap*, dados os valores de g e Λ , podem ser obtidos. A Fig. 3.2 mostra a curva característica do parâmetro supercondutor em função da temperatura, para $g = 2$, $g = 4$ e $g = 6$, todos para $\Lambda = 1$. Com a Eq. (3.30) podemos encontrar os valores de $|\tilde{\Delta}|$ em $T = 0$, usando diversos valores de g . Temos que $g = 2$ implica $|\tilde{\Delta}| = \sqrt{(2g/3\Lambda)^2 - 1} = \sqrt{(4/3)^2 - 1} = 0.88$, $g = 4$ leva à $|\tilde{\Delta}| = \sqrt{(8/3)^2 - 1} = 2.47$ e $g = 6$ implica $|\tilde{\Delta}| = \sqrt{(12/3)^2 - 1} = 3.87$, que são exatamente os valores

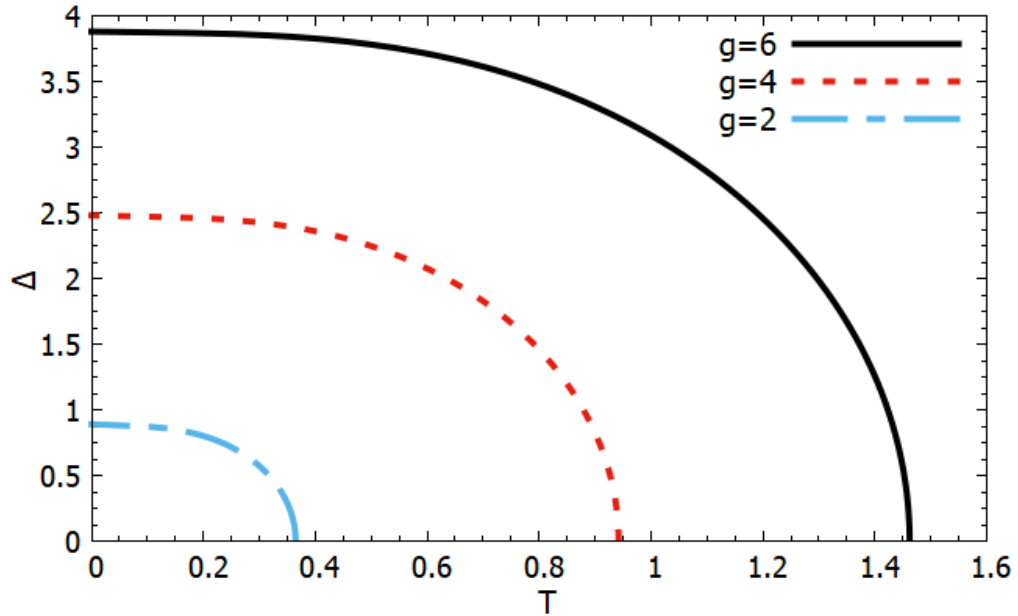


Figura 3.2: $|\tilde{\Delta}|$ em função da temperatura, para $\Lambda = 1$.

representados na Fig. 3.2 para $T = 0$. Além disso, à medida que a interação g diminui, a curva supercondutora se torna menos expressiva, assumindo valores menores de parâmetro supercondutor máximo e temperatura crítica, tendendo ao desaparecimento completo em $g = g_c = 3/2$.

Nesse capítulo calculamos o potencial efetivo para férmions de Majorana emergentes na superfície de um IT com supercondutividade induzida, para diferentes tipos de parâmetro supercondutor. Discutimos a possibilidade da emergência de férmions de Majorana em supercondutores de alta temperatura crítica e encontramos as condições necessárias para que supercondutividade possa ser induzida na superfície de um IT. Estes resultados foram desenvolvidos durante o curso de Doutorado em Física Aplicada da Universidade Federal de Viçosa e publicados na revista *Physics Letters A* pelos autores A. W. Teixeira, V. L. Carvalho-Santos e J. M. Fonseca, sendo partes deste capítulo traduções livres desse artigo [77].

Capítulo 4

Supercondutividade Topológica em Cupratos

4.1 Introdução

No capítulo anterior, encontramos uma equação de *gap* supercondutor equivalente àquela encontrada para cupratos supercondutores. Cupratos são materiais que apresentam supercondutividade de alta temperatura crítica, motivo pelo qual a teoria BCS falha ao explicar o surgimento do estado supercondutor. Esses materiais são constituídos por uma estrutura em camadas, contendo aquelas respectivas aos íons de cobre e oxigênio, os planos de CuO_2 , e as demais camadas que se comportam como um reservatório de carga, o que torna possível a dopagem dos planos de CuO_2 com elétrons ou buracos. Dois exemplos de estrutura podem ser vistos na Figura 4.1, referentes aos cupratos $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ e $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$.

Cupratos cujos planos de cobre e oxigênios não são dopados, que corresponde a $\mu = 0$, e abaixo de uma temperatura crítica, ou temperatura de Néel, são materiais isolantes com ordem antiferromagnética. Porém, à medida que portadores de carga são adicionados ao sistema, sendo $\mu > 0$ para buracos e $\mu < 0$ para elétrons, o ordenamento antiferromagnético é suprimido, enquanto o material se torna supercondutor. Caso este continue sendo dopado, a supercondutividade cessa, dando origem a um diagrama de fases característico [97]. Além disso, há uma forte ligação

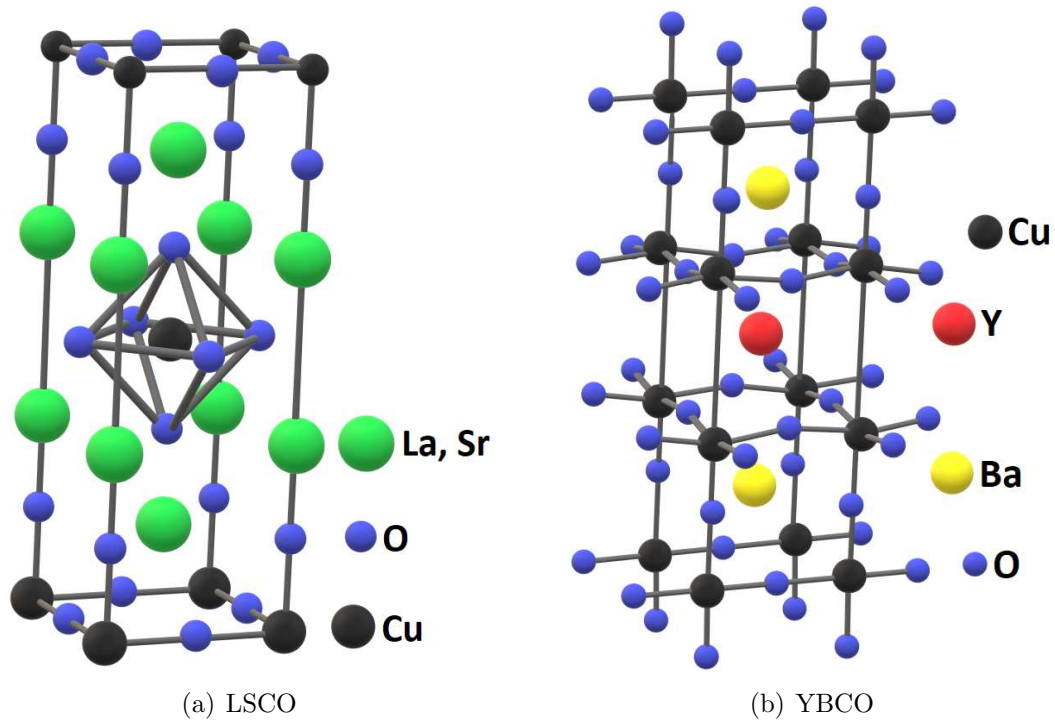


Figura 4.1: Estruturas cristalinas para os cupratos (a) $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ e (b) $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$.

entre os íons de cobre e oxigênio nos planos, em que íons de cobre apresentam uma banda eletrônica d fortemente correlacionada na condição de semi-preenchimento, cujos spins localizados interagem entre si por uma interação magnética de troca, mediada pelos orbitais p dos íons de oxigênio. Essas características principais desses materiais indicam que a fenomenologia importante está relacionada ao movimento de elétrons nos planos de CuO_2 , ocasionado pela interação dos spins nos planos.

Um modelo completo que descreve o surgimento da supercondutividade de alta temperatura crítica presente nesses materiais deve levar em consideração, portanto, as interações entre os spins localizados, destes com os spins dos portadores de carga e a interação de repulsão Coulombiana entre os férmions itinerantes. Como forte candidato para explicar tal fenomenologia, o conhecido modelo de três bandas, que pelo fato de descrever detalhadamente os planos de cobre e oxigênio levando mui-

tos parâmetros em consideração, tem uma análise complicada. Porém, é possível deduzir um novo modelo a partir dele, conhecido como modelo de spin-férmions, capaz de descrever o sistema com uma quantidade menor de graus de liberdade. Análises utilizando tal modelo levam a um diagrama de fases antiferromagnético e supercondutor, em acordo com o esperado [83, 84], e é justamente o modelo que leva à equação de *gap* equivalente à encontrada para supercondutividade induzida na superfície de um IT.

Além da equivalência entre as equações de *gap*, os cupratos também se mostram possíveis candidatos a apresentarem férmions de Majorana por outros motivos, como discutido no capítulo anterior. O modelo tratado para supercondutividade induzida e topológica em um IT assume um sistema bidimensional, assim como ocorre em cupratos, que são materiais constituídos por camadas, sendo supercondutividade emergente nos planos (quasi-)bi-dimensionais de CuO_2 . Além disso, cupratos são materiais que possuem um *gap* supercondutor característico, de onda d , que pode contribuir para emergência natural de férmions de Majorana nos planos. Nessa parte do trabalho, iremos investigar a possível emergência de férmions de Majorana nos planos de cobre e oxigênio de cupratos e verificar se estados topológicos podem, então, estar presentes nesse material.

4.2 Férmions de Majorana em Cupratos

Para estudar a possibilidade de estados topológicos associados a férmions de Majorana, podemos partir da Hamiltoniana encontrada para Cupratos, seguindo o modelo de spin-férmion. A partir dessa Hamiltoniana, é possível procurar por spinores que obedeçam à condição para que estejam relacionados aos férmions de Majorana, e que produzem estados com modo zero de energia. A Hamiltoniana proposta para supercondutividade nos planos de cobre e oxigênio em cupratos supercondutores de alta temperatura crítica é, no espaço dos momentos [83]

$$H_{HTc} = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Phi^\dagger(k) H_{BdG,HTc} \Phi(k), \quad (4.1)$$

em que o campo de Nambu, $\Phi^\dagger(k)$, é dado em função dos campos fermiônicos, $\psi_{1,\sigma}^\dagger(k)$ e $\psi_{2,\sigma}^\dagger(k)$, com σ representando os spins $\{\uparrow, \downarrow\}$, sendo

$$\Phi^\dagger(k) = \left(\psi_{1,\uparrow}^\dagger(k) \ \psi_{2,\uparrow}^\dagger(k) \ \psi_{1,\downarrow}(-k) \ \psi_{2,\downarrow}(-k) \right) \quad (4.2)$$

e

$$H_{BdG,HTc} = \begin{pmatrix} -\mu_+ + N_- & -\hbar v_f k_- & 0 & -\Delta \\ -\hbar v_f k_+ & -\mu_- + N_- & -\Delta & 0 \\ 0 & -\Delta^* & \mu_+ - N_+ & \hbar v_f k_+ \\ -\Delta^* & 0 & \hbar v_f k_- & \mu_- - N_+ \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

em que $\mu_\pm = \mu \pm M$, $N_\pm = N \pm s_z$ e $k_\pm = k_y \pm ik_x$. Na Eq. 4.3 μ é o potencial químico que determina a dopagem dos planos de cobre e oxigênio, sendo $\mu > 0$ para buracos e $\mu < 0$ para elétrons, e M , N e s_z são campos auxiliares de Hubbard-Stratonovich relativos a um *gap* de carga isolante (M e N) e a uma interação entre spin-spin anisotrópica (s_z).

A princípio, assumiremos os demais termos, exceto o potencial químico e M , iguais à zero e $\hbar v_f = 1$. Dessa forma, o cálculo é simplificado e assim podemos realizar uma análise particular do sistema. A Hamiltoniana BdG nesse caso pode ser escrita tal que

$$H_{BdG,HTc} = \begin{pmatrix} -\mu_+ & -k_- & 0 & -\Delta \\ -k_+ & -\mu_- & -\Delta & 0 \\ 0 & -\Delta^* & \mu_+ & k_+ \\ -\Delta^* & 0 & k_- & \mu_- \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

cujos autovalores são, para $\mu = 0$,

$$\begin{aligned} E_1 &= \sqrt{k^2 + (|\Delta| + M)^2} \\ E_2 &= \sqrt{k^2 + (|\Delta| - M)^2} \\ E_3 &= -\sqrt{k^2 + (|\Delta| + M)^2} \\ E_4 &= -\sqrt{k^2 + (|\Delta| - M)^2}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

O espectro de energia encontrado é o mesmo para o caso de um IT em duas dimensões com um *gap* de energia adicionado nas bordas. A análise desse caso particular e sua relevância para a emergência de férmions de Majorana foi feita previamente, mostrando que tal sistema simula condições para o surgimento de estados de férmions de Majorana desemparelhados [10].

Para que a Hamiltoniana (4.4) produza modos zero de Majorana precisamos que atue em um autoestado Ψ_0 , produzindo por consequência estados de energia nula, tal que

$$H_{BdG,HTc} \Psi_0 = 0. \quad (4.6)$$

Supondo a existência de Ψ_0 , este irá produzir um estado de modo zero de energia Φ_0^\dagger que deve satisfazer

$$\Phi_0^\dagger = \int d^2r \Psi_0^\dagger \Phi. \quad (4.7)$$

Por outro lado, para que Φ_0^\dagger não só esteja relacionado à energia nula, mas que também caracterize Férmion de Majorana, deve ser tal que $\Phi_0^\dagger = \Phi_0$. Escrevendo Ψ_0^\dagger explicitando cada componente,

$$\Psi_0^\dagger = f(r) (u_1 \ u_2 \ u_3 \ u_4), \quad (4.8)$$

e reescrevendo a Eq. 4.7 em termos dessas mesmas componentes, temos

$$\Phi_0^\dagger = \int d^2r f(r) \left(u_1 \psi_{1,\uparrow} + u_2 \psi_{2,\uparrow} + u_3 \psi_{1,\downarrow}^\dagger + u_4 \psi_{2,\downarrow}^\dagger \right). \quad (4.9)$$

Vemos na equação acima que, se u_i é independente de $\psi_{i,\sigma}$, a princípio, não existe combinação possível para que $\Phi_0^\dagger = \Phi_0$, não sendo permitido obter um estado que satisfaça a condição para que compreenda Férmions de Majorana. O mesmo ocorre para o estudo inicial do formalismo BdG para supercondutores de onda- s [10], em que uma matriz 2×2 não é suficiente para descrever a fenomenologia estudada, mas com a introdução de um formalismo redundante, que escreve a Hamiltoniana 4×4 , foi possível desenvolver a análise, sem que a descrição do sistema fosse alterada. Esse novo formalismo não só modifica o tamanho da matriz Hamiltoniana como também muda o tamanho e as componentes dos operadores de Nambu. Para o caso atual podemos reescrever o operador de Nambu usando a mesma técnica, definindo

$$\Phi^\dagger = \left(\psi_{1,\uparrow}^\dagger(k) \ \psi_{2,\uparrow}^\dagger(k) \ \psi_{1,\downarrow}^\dagger(k) \ \psi_{2,\downarrow}^\dagger(k) \ \psi_{1,\downarrow}(-k) \ \psi_{2,\downarrow}(-k) \ \psi_{1,\uparrow}(-k) \ \psi_{2,\uparrow}(-k) \right). \quad (4.10)$$

Esse novo operador é capaz de descrever o sistema com mais detalhes, em especial porque explicita mais combinações dos dois operadores fermiônicos distintos, cujos índices são 1 e 2 [84]. Com isso, é necessário reescrever a Hamiltoniana BdG em uma matriz 8×8 , em acordo com o novo operador de Nambu, e que gera a mesma forma das interações iniciais, que fica, a menos de uma constante,

$$H_{BdG,HTc} = \begin{pmatrix} \bar{\mu} + \bar{k}_1 & 0 & \bar{\Delta} & 0 \\ 0 & \bar{\mu} - \bar{k}_1 & 0 & -\bar{\Delta} \\ \bar{\Delta}^* & 0 & -\bar{\mu} - \bar{k}_2 & 0 \\ 0 & -\bar{\Delta}^* & 0 & -\bar{\mu} + \bar{k}_2 \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

em que

$$\bar{\Delta} = - \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ \Delta & 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{k}_{1,2} = - \begin{pmatrix} 0 & k_{-,+} \\ k_{+,-} & 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mu} = - \begin{pmatrix} \mu_+ & 0 \\ 0 & \mu_- \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

É interessante mencionar que o sinal de alguns dos operadores de momento, k , foram alterados apenas como uma manipulação matemática. Isso pode ser feito,

assim como no capítulo anterior, levando em consideração a integral no espaço dos momentos e fazendo $k \rightarrow -k$, sem que haja qualquer perda, ou mudança, na física do problema.

Reescritos os operadores de Nambu e a Hamiltoniana BdG, podemos agora definir um *ansatz* de modo zero

$$\Psi_0^\dagger = \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] (A^* \ 0 \ B^* \ 0 \ C^* \ 0 \ D^* \ 0), \quad (4.13)$$

o que leva a

$$\Phi_0^\dagger = \int d^2r \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \left(A^* \psi_{1,\uparrow}^\dagger + B^* \psi_{1,\downarrow}^\dagger + C^* \psi_{1,\downarrow} + D^* \psi_{1,\uparrow} \right). \quad (4.14)$$

Para satisfazer a condição de férmions de Majorana $\Phi_0^\dagger = \Phi_0$, o que implica $D^* = A$ e $C^* = B$, as expressões acima ficam

$$\Psi_0^\dagger = \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] (A^* \ 0 \ B^* \ 0 \ B \ 0 \ A \ 0) \quad (4.15)$$

e

$$\Phi_0^\dagger = \int d^2r \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \left(A^* \psi_{1,\uparrow}^\dagger + B^* \psi_{1,\downarrow}^\dagger + B \psi_{1,\downarrow} + A \psi_{1,\uparrow} \right). \quad (4.16)$$

Nesse ponto, apesar de $\mu = 0$ não representar um estado supercondutor nos cupratos, por simplicidade, assumiremos $\mu_\pm = 0$, a fim de verificar se existe solução possível para o problema proposto de forma simplificada, como caso particular. Por outro lado, apesar do modelo ser aplicado aos cupratos, o mesmo descreve quaisquer planos de cobre e oxigênio. Com isso, caso algum mecanismo produza supercondutividade nesses planos sem que haja dopagem, sendo tais planos presentes ou não nos cupratos, o cálculo se torna fisicamente aceitável. Além disso, reescreveremos o parâmetro supercondutor, usando uma fase com sinal arbitrário, $\Delta = |\Delta(r)| e^{\pm i\theta(r)}$ [8, 10].

Para encontrarmos os coeficientes A e B devemos atuar a Hamiltoniana (4.11) em Ψ_0 , o que resulta em (escolhendo a transformação de Δ com sinal negativo, $\Delta = |\Delta(r)|e^{-i\theta(r)}$)

$$\begin{cases} A^*k_+ \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] + B|\Delta(r)|e^{-i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \\ -B^*k_+ \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] - A|\Delta(r)|e^{-i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \\ -Bk_- \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] + A^*|\Delta(r)|e^{i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \\ Ak_- \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] - B^*|\Delta(r)|e^{i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \end{cases} = 0. \quad (4.17)$$

Agora é necessário atuar com os operadores de momento. Para isso, será necessário reescrever k_{\pm} tal que $k_{\pm} = k_y \pm ik_x = -i(\partial/\partial y) \pm (\partial/\partial x)$. Além disso, o problema necessita que tratemos os operadores em coordenadas polares, o que corresponde a (ver Apêndice C)

$$k_{\pm} = \pm \left[\cos(\theta) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] - i \left[\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} \right]. \quad (4.18)$$

Isto é, os operadores de momento atuados nas exponenciais das equações em (4.17) levam ao resultado

$$k_{\pm} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] = [\pm \cos(\theta) - i \sin(\theta)] |\Delta| \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right]. \quad (4.19)$$

É possível agora resolver a Eq. (4.17) e encontrar a solução para os coeficientes A e B , que satisfaz

$$\begin{cases} A^* + B \\ -B^* - A \\ B + A^* \\ -A - B^* \end{cases} = 0, \quad (4.20)$$

e que tem solução real imediata $A = -B = \pm 1$. Finalmente, escolhendo a solução positiva para A , Φ_0^\dagger que produz modo zero de Majorana é

$$\Phi_0^\dagger = \int d^2r \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \left(\psi_{1,\uparrow}^\dagger(r) - \psi_{1,\downarrow}^\dagger(r) - \psi_{1,\downarrow}(r) + \psi_{1,\uparrow}(r) \right). \quad (4.21)$$

Apesar do resultado acima reproduzir estados de férmions de Majorana em modo zero de energia, não corresponde a um estado supercondutor em cupratos. Isso porque Cupratos sem dopagem, com $\mu = 0$, não apresentam tal fase, como mencionado anteriormente. Portanto, para que seja possível verificar a existência desses modos em cupratos, é necessário introduzir o potencial químico diferente de zero.

Consideremos, então, a Hamiltoniana (4.11) completa, que quando atua em Ψ_0 leva às novas equações

$$\left\{ \begin{array}{l} A^* k_+ \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] + \frac{\mu_+ A^*}{B} |\Delta(r)| e^{-i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \\ - B^* k_+ \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] - \frac{\mu_+ B^*}{A} |\Delta(r)| e^{-i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \\ - B k_- \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] + \frac{-\mu_+ B}{A^*} |\Delta(r)| e^{i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \\ A k_- \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] - \frac{-\mu_+ A}{B^*} |\Delta(r)| e^{i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \end{array} \right. = 0, \quad (4.22)$$

que é satisfeita para $A = -B = \pm 1$, assim como no resultado encontrado anteriormente para o caso particular de $\mu = 0$, e que leva à Eq. 4.21, porém agora satisfazendo também a condição de $\mu_+ = 0 \Rightarrow \mu = -M \neq 0$.

Isto é, o sistema apresenta férmions de Majorana em modo zero de energia, no seu estado supercondutor, desde que o potencial químico esteja relacionado à $-M$, com $\mu = -M \neq 0$. Esse resultado é muito interessante pois mostra como planos de cobre e oxigênio podem fornecer condições para a emergência de férmions de Majorana naturalmente.

Além disso, o resultado mostra que encontramos modos zero de Majorana para ψ_1 , mas não ψ_2 . É possível calcular o mesmo para $\Phi_0^\dagger = \Phi_{0,2}^\dagger$, que seria relacionado a ψ_2 . Basta assumirmos como *ansatz*

$$\Psi_0^\dagger = \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] (0 \ A^* \ 0 \ B^* \ 0 \ C^* \ 0 \ D^*), \quad (4.23)$$

que leva a

$$\Phi_0^\dagger = \int d^2r \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \left(A^* \psi_{2,\uparrow}^\dagger + B^* \psi_{2,\downarrow}^\dagger + C^* \psi_{2,\downarrow} + D^* \psi_{2,\uparrow} \right), \quad (4.24)$$

que por sua vez deve satisfazer a condição de Majorana, em que $\Phi_0^\dagger = \Phi_0$, implicando $D^* = A$ e $C^* = B$, como anteriormente, ou ainda

$$\Psi_0^\dagger = \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] (0 \ A^* \ 0 \ B^* \ 0 \ B \ 0 \ D). \quad (4.25)$$

Para encontrarmos os coeficientes A e B usaremos a mesma transformação em Δ que anteriormente, mas agora escolhendo $\Delta = |\Delta(r)|e^{i\theta(r)}$, e atuar a Hamiltoniana (4.11) no novo Ψ_0 , o que leva à equação

$$\left\{ \begin{array}{l} A^* k_- \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] + B |\Delta(r)| e^{i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \\ \quad \mu_- A^* \\ -B^* k_- \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] - A |\Delta(r)| e^{i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \\ \quad \mu_- B^* \\ -B k_+ \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] + A^* |\Delta(r)| e^{-i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \\ \quad -\mu_- B \\ Ak_+ \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] - B^* |\Delta(r)| e^{-i\theta(r)} \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \\ \quad -\mu_- A \end{array} \right. = 0, \quad (4.26)$$

ou ainda

$$\left\{ \begin{array}{l} -A^* + B \\ B^* - A \\ -B + A^* \\ A - B^* \end{array} \right. = 0, \quad (4.27)$$

que é satisfeita quando A e B são reais e $A = B$ e $\mu_- = 0 \Rightarrow \mu = M \neq 0$.

O que torna essa situação peculiar, e diferente da anterior, são os fatos de que agora esse estado está relacionado à $\mu_- = 0$, e não μ_+ e que o sinal da fase no vórtice no parâmetro supercondutor é diferente, além da condição ser $A = B$, e não $A = -B$.

A solução para Φ_0^\dagger nesse caso é, portanto,

$$\Phi_0^\dagger = \int d^2r \exp \left[\int_0^r |\Delta(r')| dr' \right] \left(\psi_{2,\uparrow}^\dagger(r) + \psi_{2,\downarrow}^\dagger(r) + \psi_{2,\downarrow}(r) + \psi_{2,\uparrow}(r) \right). \quad (4.28)$$

Com clareza, obtivemos dois estados com modo zero de Majorana: $\mu = -M$ e um vórtice supercondutor $|\Delta(r)|e^{-i\theta(r)}$, que gera estados de Majorana com ψ_1 , e $\mu = M$ com um vórtice supercondutor $|\Delta(r)|e^{i\theta(r)}$, que gera estados de Majorana com ψ_2 . Os resultados trazem uma motivação para que o sistema continue sendo estudado, de forma promissora em se obter e controlar férmions de Majorana em cupratos a altas temperaturas.

Nesse capítulo discutimos a possibilidade de supercondutores de alta temperatura crítica do tipo Cupratos apresentarem ordenamento topológico, o que prevê condições para a emergência de férmions de Majorana. Mostramos que, em determinadas condições, o sistema apresenta estados com modo zero de Majorana. Estes resultados foram desenvolvidos durante o curso de Doutorado em Física Aplicada da Universidade Federal de Viçosa e estão em fase de redação [100].

Capítulo 5

Transição de fase topológica no transporte de skyrmion

5.1 Introdução

Buscamos por sistemas físicos cujas propriedades ofereçam ordenamento topológico a fim de estudar suas propriedades. Como discutido, tal ordenamento oferece proteção topológica e, por consequência, essas estruturas são invariantes e estáveis, em determinados aspectos, sob deformação. Configurações magnéticas, por exemplo, são capazes de apresentar estruturas topologicamente estáveis e podem possuir proteção topológica. Uma estrutura em particular que tem sido alvo de investigação são os skyrmions magnéticos, apresentados como configurações circulares, simétricas e planares do tipo vórtices, que ocorrem em redes de spin e que são formados, especialmente, na presença de um campo magnético e devido à competição das interações de troca e de Dzyaloshinskii-Moriya (DM) [15, 16].

Enquanto estrutura magnética, a dinâmica do Skyrmion deve obedecer a equação de Thiele [101], que lembra a equação de Newton para uma partícula sem massa. Essa equação é derivada da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) [102, 103], e descreve a dinâmica de spin induzida por corrente para uma estrutura magnética rígida com forças independentes do tempo [14, 23, 104, 105]. Porém, a adição de um termo de massa na equação de Thiele se faz necessária pois, tanto um experimento

que assume trajetórias de um único skyrmion [106], quanto análises de simetria [26, 108], propõem que o skyrmion seja uma configuração de massa não nula. A capacidade do sistema de armazenar energia inercial durante o movimento dá origem à massa inercial do skyrmion [107, 108], o que está relacionado à deformação no seu formato, que por sua vez depende da velocidade [25].

É possível adicionar o termo de massa à equação de Thiele através do produto da massa efetiva do skyrmion, \mathcal{M} , pela aceleração, $\ddot{\mathbf{R}}$. O termo de massa corresponde a uma matriz de elementos $\mathcal{M}_{i,j}$, que compreende a soma de elementos que surgem da dinâmica conservativa e elementos de contribuição dissipativa, que dependem da configuração de momento magnético do skyrmion e de sua velocidade. Além disso, também é possível relacionar os termos da diagonal com a contribuição de força dissipativa da equação de Thiele, \mathcal{D} , que depende da geometria do skyrmion [25, 109]. Já os demais termos são relacionados com a força de Magnus exercida pela textura magnética do skyrmion em movimento, $g = 4\pi Q$, onde Q é a carga topológica do skyrmion.

Nesse contexto, para um skyrmion em repouso, o que implica um skyrmion simétrico, as componentes da diagonal são equivalentes entre si e representam a massa escalar usual, ou seja, $\mathcal{M}_{x,x} = \mathcal{M}_{y,y}$. Porém, como tais termos estão relacionados à geometria do skyrmion, e existe uma deformação do skyrmion quando este se movimenta, nesse regime tais elementos de massa mudam de acordo com a deformação. Durante o movimento, um auto-campo é gerado pelo próprio skyrmion, causando este efeito, o que gera uma assimetria em sua forma e a desigualdade dessas massas, tornando os elementos da diagonal diferentes. Há, desse modo, uma relação entre velocidade, deformação e os termos da diagonal da matriz massa, $\mathcal{M}_{x,x}$ e $\mathcal{M}_{y,y}$ do skyrmion. Por outro lado, os demais termos de massa dependem do invariante topológico Q . Como Q é constante de acordo com a deformação do skyrmion, a menos que junto à deformação ocorra uma transição de fase topológica e a carga total da rede mude, tais elementos de massa continuam invariantes com respeito a

toda a rede. Isso implica que, caso efeitos dinâmicos alterem o formato do skyrmion, nada acontece com esses termos de massa. Porém, se tais efeitos mudarem a carga topológica total da rede, haverá uma mudança dos termos de massa a ela relacionados.

Nessa parte do trabalho, realizamos simulações de Monte-Carlo a fim de obter a deformação do skyrmion à medida que ele se movimenta. Como mencionado, existe uma relação entre a deformação do skyrmion e sua massa. À medida que o skyrmion se move, é gerado o auto-campo, que depende da velocidade, e que é adicionado ao campo externo, deformando o skyrmion. Com essa deformação calculamos a contribuição de força dissipativa da equação de Thiele, \mathcal{D} , em função da velocidade do skyrmion. Tal contribuição é diretamente relacionada à massa, tendo assim o mesmo comportamento à medida que a velocidade do skyrmion varia. Também encontramos a energia DM por sítio para cada velocidade, o que reforça o estudo do modo como se deforma o skyrmion.

Além disso, estudamos efeitos para velocidades altas. Acima de uma velocidade crítica surgem condições para o aumento do número de skyrmions na rede, além de causar sua deformação. Esse aumento do número de skyrmions claramente caracteriza uma transição de fase topológica. Com isso, é esperado que haja uma consequente mudança dos termos de massa da não diagonal, além da mudança de carga topológica total da rede. Por outro lado, encontra-se um limite para a quantidade de skyrmions formados, que depende do tamanho da rede.

5.2 Modelo Teórico

Como discutido, é esperado que configurações do tipo skyrmions, presentes em redes magnéticas, deformem quando os mesmos se movimentam. Sua deformação depende de sua velocidade, assim como sua massa.

Consideremos uma rede de spin triangular com condições de contorno hexagonais. A escolha desse tipo de rede se dá pelo fato dessas condições melhor descreve-

rem sistemas físicos reais devido a simetria circular dos skyrmions [110]. Isso implica que os momentos magnéticos dos sítios em arestas opostas tem o mesmo valor. Uma configuração de 15 sítios por aresta, por exemplo, possui um total de 631 sítios, que são classificados pelos índices i, j . O modelo assume, a princípio, uma Hamiltoniana que contenha uma interação de troca, J , entre os momento magnético tridimensional de cada sítio, $\mathbf{S}_{i,j}$, com seus primeiros vizinhos, uma interação desse com um campo magnético externo, \mathbf{B} , um termo de anisotropia, K , e um acoplamento DM, $\mathbf{D}_{i,j,i',j'}$. Esse último acoplamento pode ser um vetor tanto perpendicular quanto paralelo ao vetor que conecta dois spins vizinhos i, j e i', j' , e se encontra no plano da rede. Tal direção determina se o skyrmion será um skyrmion do tipo Bloch ou do tipo Néel. Para um vetor perpendicular ao vetor que conecta dois spins vizinhos, a configuração esperada para o skyrmion é do tipo Néel, enquanto que para um vetor que conecta dois spins vizinhos a configuração esperada é do tipo Bloch. Além de ser o principal responsável pela formação de um skyrmion na rede, esse acoplamento determina a forma do campo vetorial do mesmo. Já a interação é feita assim como na Fig. 5.1, em que um sítio particular, classificados pelos índices i, j , interage com seus primeiros vizinhos, circulos em verde. A Hamiltoniana correspondente a esse sistema é

$$\begin{aligned}
H = & -J \sum_{\langle(i,j),(i',j')\rangle} \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i',j'} - \mu \sum_{i,j} \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}_{i,j} - K \sum_{i,j} S_{i,j,z}^2 \\
& - \sum_{\langle(i,j),(i',j')\rangle} \mathbf{D}_{i,j,i',j'} \cdot (\mathbf{S}_{i,j} \times \mathbf{S}_{i',j'}). \tag{5.1}
\end{aligned}$$

O propósito é realizar simulações de Monte Carlo utilizando a Hamiltoniana da Eq. 5.1, que descreve a rede. A simulação assume que o sistema esteja em uma dada temperatura, T , suficientemente pequena para que se obtenha uma configuração final de skyrmion, dadas algumas condições, e que não afete significativamente suas características físicas. Quando o skyrmion se move a uma dada velocidade, \mathbf{v} , um auto-campo é gerado e então é possível observar sua deformação. À medida que a velocidade muda, a forma como o skyrmion se deforma também muda. Tal de-

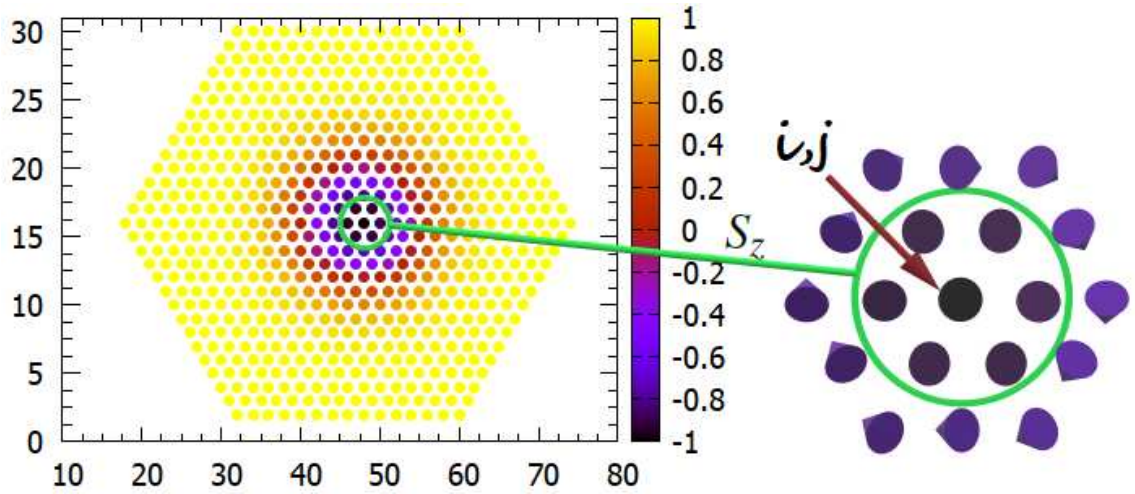


Figura 5.1: Representação da rede de spin hexagonal considerada. O *inset* mostra um sítio particular da rede, classificado pelos índices i, j , com seus primeiros vizinhos, circulado em verde.

formação é intimamente ligada ao termo de força dissipativa da equação de Thiele, \mathcal{D} , que por sua vez é relacionado à massa do Skyrmion.

Essa deformação, que ocorre devido a um auto-campo, $\delta\mathbf{B}$, gerado pelo skyrmion quando o mesmo se movimenta, é dada pela equação [25]

$$\delta\mathbf{B} = \frac{2\pi}{\gamma a} \mathbf{S} \times (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{S}, \quad (5.2)$$

em que γ é a razão giromagnética e a o parâmetro de rede. A equação 5.2 mostra que um auto-campo é gerado dependente não só da velocidade, mas da configuração de momento magnético do skyrmion, \mathbf{S} . Isso implica que à medida que o skyrmion se movimenta e se deforma, o auto-campo gerado também muda, devido a tal deformação. O campo efetivo responsável por essa deformação corresponde à soma de $\delta\mathbf{B}$, que se comporta como um campo externo atuante, com o próprio campo externo aplicado, \mathbf{B} . A configuração de spin do sistema se deforma até que o mesmo entre em equilíbrio, cujo resultado é um skyrmion deformado, com uma configuração \mathbf{S} conhecida, e um auto-campo também conhecido, ambos se movimentando na rede com velocidade \mathbf{v} .

Já a matriz de massa, \mathcal{M} , pode ser estudada através da equação de Thiele

$$\mathcal{M}\dot{\mathbf{v}}(t) + g\hat{z} \times \mathbf{v}(t) + \alpha\mathcal{D}\mathbf{v}(t) = \mathbf{F} + \eta(t), \quad (5.3)$$

em que o segundo termo descreve uma força de Magnus, que no caso para um skyrmion isolado possui $g = 4\pi Q$, a terceira contribuição representa uma força dissipativa, onde

$$\mathcal{D}_{i,j} = \int d\mathbf{r} \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial x^i} \cdot \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial x^j} \right) (\{i, j\} = \{x, y\}) \quad (5.4)$$

e α é o fator de amortecimento, $\mathbf{F} = -\partial_{\mathbf{R}}U$, sendo U o potencial magnetostático e $\eta(t)$ um termo de ruído que, se negligenciado, converge à Eq. 5.3 a equação de Thiele generalizada [101].

Como mencionado, os elementos de massa são relacionados à geometria do skyrmion. Quando o skyrmion se deforma, tais elementos são alterados, de acordo com a direção do movimento. Os elementos da diagonal principal da matriz de massa podem ser relacionados ao termo de força dissipativa, tal que

$$\mathcal{M}_{i,i} = \lambda\xi\mathcal{D}_{i,i}, \quad (5.5)$$

em que λ depende da força com que o skyrmion é deformado e ξ depende da constante de troca, do parâmetro de rede e do tamanho característico do skyrmion [25]. Para um skyrmion isolado, e portanto simétrico, $\mathcal{D}_{x,x} = \mathcal{D}_{y,y} = \mathcal{D}$, o que implica $\mathcal{M}_{x,x} = \mathcal{M}_{y,y} = \lambda\xi\mathcal{D}$. Já os elementos da diagonal secundária podem ser obtidos por

$$\mathcal{M}_{i,j} = 4\pi\lambda\xi\alpha Q_{i,j}; \quad i \neq j, \quad (5.6)$$

em que α é uma constante que vem da equação de Thiele e $|Q_{i,j}| = Q$ a carga do skyrmion, calculada como

$$Q_{i,j} = \frac{1}{4\pi} \int dr^2 \mathbf{S} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial x^i} \times \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial x^j} \right), \quad (5.7)$$

sendo $Q = 1$ para um único skyrmion e $\mathcal{M}_{i,j} = -\mathcal{M}_{j,i}$. Como Q é invariante sob a deformação do skyrmion, a menos que o mesmo mude sua carga e sofra uma transição

topológica, os elementos da diagonal secundária da matriz são constantes, mesmo quando o skyrmion se move. Tal transição de fase não ocorre até um determinado limite de velocidade, acima do qual a quantidade de skyrmions na rede aumenta. Acima desse limite, a carga topológica total da rede muda, devido a tal aumento da quantidade de skyrmions, e pode ser calculada pela Eq. (5.7). Há, portanto, uma relação da massa do skyrmion com sua carga topológica.

5.2.1 Método

Para simular a rede de spin, a fim de obter uma configuração de skyrmion, foi usado o método de Monte Carlo, assumindo inicialmente as constantes de campo magnético externo perpendicular à rede, $\mu B = 0.1 J$, $D = 0.32 J$ e $K = 0.07 J$, todas referentes à Eq. (5.1), com 5×10^5 passos de Monte Carlo e $k_B T = 0.001 J$. Espera-se que, tanto tais valores de constantes quanto de temperatura sejam suficientes para gerar um skyrmion estável [110]. Aqui, $\mathbf{D}_{i,j,i',j'}$ é um vetor que conecta dois spins vizinhos $S_{i,j}$ e $S_{i',j'}$. Assumimos ainda que cada lado da rede tem 15 sítios, o que leva a um total de 631 sítios. A simulação ocorre na rede calculando-se, sítio por sítio, a probabilidade do momento magnético desse respectivo sítio mudar para um momento magnético aleatório, caso um critério pré estabelecido seja satisfeito. Um passo de Monte Carlo significa que a simulação percorreu todos os sítios da rede.

Partindo de uma condição inicial aleatória para os momentos magnéticos de cada sítio e assumindo as condições acima, inicialmente com velocidade nula, espera-se que o sistema evolva para uma configuração final de skyrmion. Dada tal configuração, o próximo passo corresponde a encontrar a configuração deformada do skyrmion, em função de sua velocidade, segundo a Eq. (5.2). A velocidade será assumida como constante e na direção x , sendo $\mathbf{v} = v_x \hat{i}$. Para essa análise, partindo da configuração de skyrmion obtida inicialmente, será adicionado o auto-campo gerado, $\delta \mathbf{B}$, ao campo externo, \mathbf{B} , o que levará a uma nova configuração de skyrmion, que estará deformado. Essa nova configuração, por sua vez, gera um novo auto-campo

que substituirá o anterior e gerará uma nova configuração. Isso se repetirá até que o skyrmion efetivamente não se deforme mais. A simulação é feita da seguinte forma:

1. A simulação começa com 5×10^5 passos de MC e as condições citadas acima, produzindo um skyrmion;
2. A configuração final possui um auto-campo efetivo, dependente da velocidade e da configuração de spin do skyrmion; o auto-campo dessa configuração é calculado;
3. Esse auto-campo é adicionado ao campo externo, caso seja o final da primeira simulação, ou substituído pelo auto-campo anterior, caso contrário;
4. Com o novo auto-campo adicionado/substituído a simulação continua até que uma nova configuração de skyrmion, agora deformado, tenha sido obtida e seja estável;
5. Retorne ao passo 2.

Após obter o resultado final, é possível calcular \mathcal{D} e, por consequência, a massa do skyrmion, para várias velocidades. Além disso, é possível calcular a carga topológica total da rede, Q , e verificar se houve transição topológica.

5.2.2 Resultados

Após a primeira etapa da simulação, em que o sistema evolui com uma velocidade e auto-campo nulos, é obtida a configuração inicial de skyrmion, que é estável e pode ser vista na Fig. 5.2(a), que mostra a configuração S_z na rede. A Fig. 5.2(b) mostra o campo vetorial no plano, para S_x e S_y do skyrmion inicial, relativo à Fig. 5.2(a). A forma desse campo depende se a interação de Dzyaloshinskii-Moriya é perpendicular ou paralela ao vetor que conecta dois spins vizinhos.

Após encontrada a configuração inicial do skyrmion, conhecida sua configuração de spin, \mathbf{S} , e definida sua velocidade, podemos calcular seu auto-campo gerado

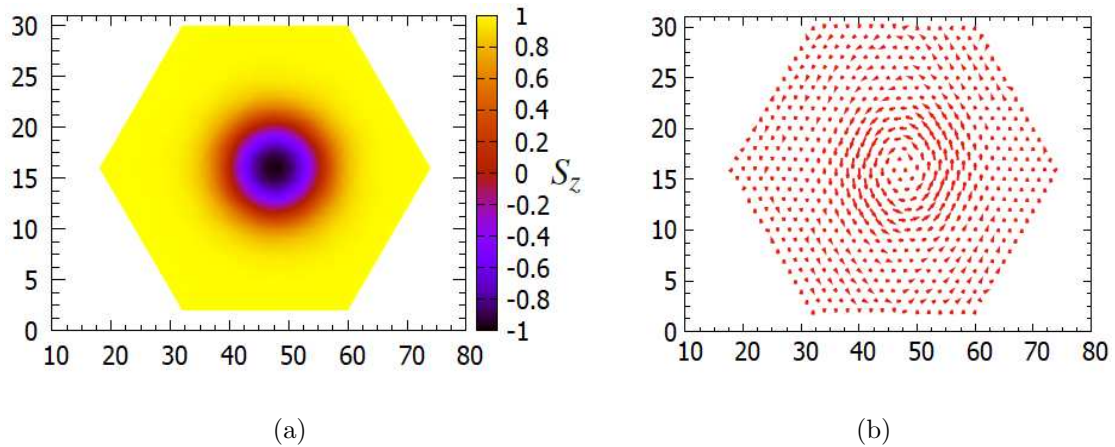


Figura 5.2: (a) Configuração inicial de S_z para um skyrmion com velocidade nula. O skyrmion obtido é estável no centro. (b) Campo vetorial no plano, para S_x e S_y do skyrmion inicial, relativo à Fig. 5.2(a).

devido a tal velocidade, usando a Eq. 5.2. Para velocidades muito baixas, é esperado que o módulo do auto-campo também seja baixo, insuficiente para deformar o skyrmion significativamente. Essa deformação somente aconteceria para energia de interação e com campo externo da ordem das demais interações. A figura 5.3(a) mostra o resultado do skyrmion para $\mathbf{v}' = 0.005$, onde \mathbf{v}' é uma constante adimensional que depende da velocidade do skyrmion, \mathbf{v} , da forma

$$\mathbf{v}' = \frac{2\pi\mu}{J\gamma a}\mathbf{v}, \quad (5.8)$$

em que $\mu = 3\mu_B$, $J = 7\text{meV}$, $a = 2.7 \times 10^{-10}\text{m}$ [110] e $\gamma = g|\mu_B|/\hbar$, o que implica $\mathbf{v} = 1.5\text{m/s}$. É possível ver que a deformação do skyrmion é insignificante comparado ao skyrmion inicial. Já a Fig. 5.3(b) mostra o auto-campo gerado, referente ao skyrmion da Fig. 5.3(a). Nessa figura é possível ver que o autocampo gerado é da ordem de $\delta\mathbf{B}/J \approx 0.01$, bem menor que as outras grandezas relevantes do sistema. Esse valor de campo se deve à velocidade considerada, que é baixa e insuficiente para deformar o skyrmion a ponto de gerar efeitos que variem sua massa de forma significativa. Isso corrobora com a pouca deformação do skyrmion, sendo esperado que sua massa se mantenha constante pelo menos até essa velocidade. Esse efeito

será melhor visualizado posteriormente, quando o termo de força dissipativa for calculado.

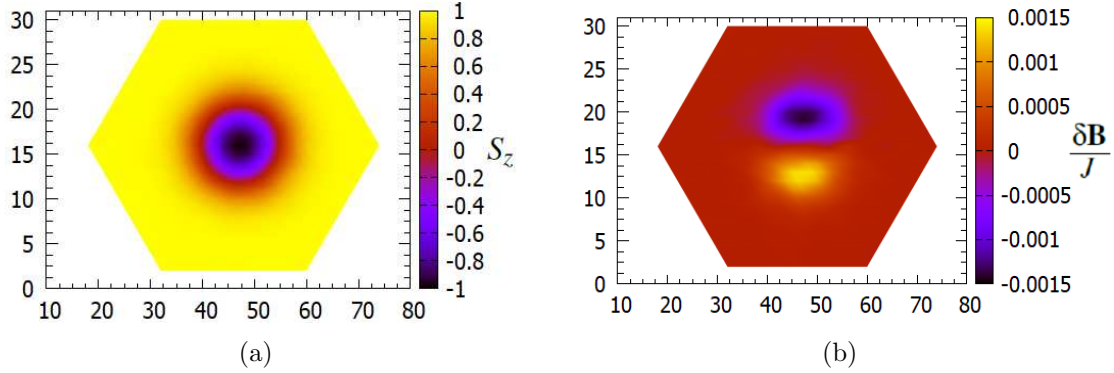


Figura 5.3: (a) skyrmion quase sem deformação para a constante $\mathbf{v}' = 0.005$, que corresponde a uma baixa velocidade de $\mathbf{v} = 1.5\text{m/s}$. (b) auto-campo gerado para o skyrmion da Fig. 5.3(a). O campo é pequeno o suficiente, em relação à outras grandezas competidoras, para gerar o skyrmion quase sem deformação da Fig. 5.3(a).

Já para $\mathbf{v}' = 0.3$, que corresponde a uma velocidade $\mathbf{v} \approx 91.3\text{m/s}$, a deformação é visível e está representada na Fig. 5.4(a). Além disso, o auto-campo gerado tem magnitude da ordem de grandeza das outras constantes competidoras, o que proporciona a deformação do skyrmion. Isso implica que, para velocidades próximas a essa, haja significativa variação da massa do skyrmion em relação a sua massa de repouso. Além disso, é esperado que para velocidades acima de $\mathbf{v}' = 0.3$ o skyrmion se deforme mais e que sua massa tenha uma maior variação.

Realizamos então uma série de simulações para determinar o comportamento do skyrmion em função da velocidade. Os valores de velocidade simulados estão contidos no intervalo de $\mathbf{v} = 0\text{m/s}$ a $\mathbf{v} = 91.3\text{m/s}$. A partir das configurações dos skyrmions com determinadas velocidades é possível encontrar, dadas as respectivas deformações, a diagonal do termo de força dissipativa, $\mathcal{D}_{i,i}$, que é equivalente à massa exceto por uma constante [25]. A Fig. 5.5 mostra as relações entre $\mathcal{D}_{x,x}$ e $\mathcal{D}_{y,y}$ com \mathbf{v}' na direção x . Nela é possível ver que, como discutido anteriormente, o parâmetro de força dissipativa, e por consequência a massa, se mantém constante até

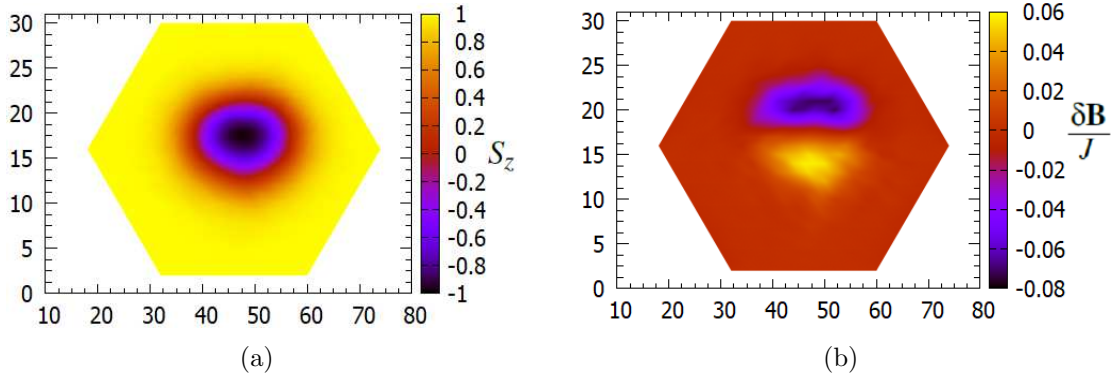


Figura 5.4: (a) skyrmion deformado para a constante $\mathbf{v}' = 0.3$, respectiva a uma velocidade de $\mathbf{v} = 91.3\text{m/s}$. (b) auto-campo gerado para o skyrmion da Fig. 5.3(a). Para essa velocidade, o campo é suficientemente grande, em relação às demais grandezas competidoras, para deformar o skyrmion.

$\mathbf{v}' \approx 0.09$, que corresponde à $\mathbf{v} \approx 27.4\text{m/s}$. Após esse valor, $\mathcal{D}_{y,y}$ cresce enquanto $\mathcal{D}_{x,x}$ diminui. Isso mostra que há uma maior resistência ao movimento em uma direção preferencial, perpendicular ao movimento do skyrmion.

Podemos ver na Fig. 5.5 que para velocidade igual a zero $\mathcal{D} \approx 15 \approx 4.78\pi$. Para $B \ll J$ e velocidade nula é esperado que $\mathcal{D} = 5.577\pi$. Porém, à medida que a relação B/J aumenta o raio do skyrmion muda, o que diminui o valor de \mathcal{D} [23]. Para o nosso caso, em que $B/J = 0.1$, \mathcal{D} encontrado é menor que o encontrado para $B \ll J$, em acordo com o esperado.

O fenômeno de deformação somente ocorre enquanto o skyrmion possui velocidade não nula. O auto-campo gerado deve estar presente na rede para que o skyrmion se mantenha deformado. Caso o mecanismo que possibilita o skyrmion ter velocidade seja desligado, o que implica $\mathbf{v}' = 0$ a partir daquele momento e por consequência um auto-campo também nulo, o skyrmion então volta ao seu estado original não deformado e com os elementos de massa simétricos.

Também podemos realizar uma análise da energia Dzyaloshinskii-Moriya por sítio, em função da velocidade. Como essa energia depende da interação do campo magnético entre primeiros vizinhos, à medida que o skyrmion se deforma e de acordo

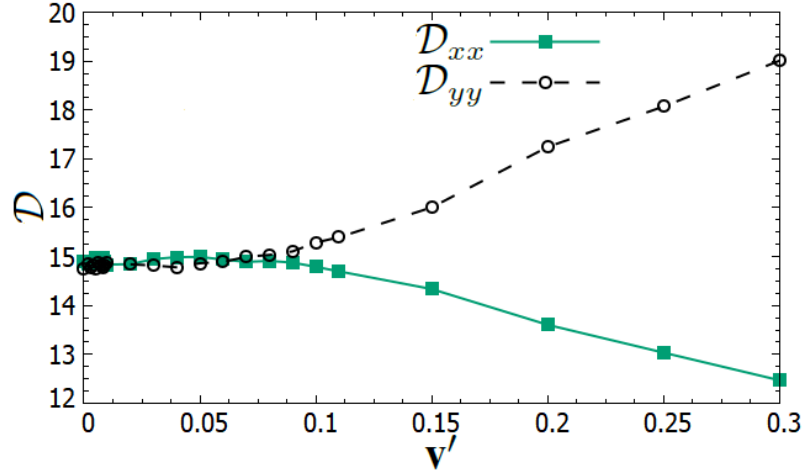


Figura 5.5: Relação de D_{xx} e D_{yy} em função de v' . D_{xx} e D_{yy} estão diretamente relacionados às massas \mathcal{M}_{xx} e \mathcal{M}_{yy} , respectivamente. A curva representada, então, também representa o comportamento da massa do skyrmion, a menos de uma constante.

com a assimetria dessa nova forma, é esperado que a energia mude em relação ao skyrmion com velocidade nula. A Fig. 5.6 mostra como é essa variação, em função também dos passos de Monte Carlo para distintos valores de velocidade. Enquanto a velocidade aumenta também há o aumento do módulo da energia. Além disso é possível ver que cada energia, para cada velocidade, possui variações não bruscas em torno de um valor médio. Isso mostra que o sistema de fato se encontra em equilíbrio e a deformação do skyrmion encontrada é a configuração estável que minimiza a energia.

As simulações também mostram que para velocidades até $v' = 0.5$ o skyrmion continua se deformando sem que haja uma transição de fase topológica. Porém, para velocidades entre $0.5 > v' \geq 0.6$, que correspondem à $152.2 \text{ m/s} > v \geq 182.6 \text{ m/s}$, a quantidade de skyrmions na rede aumenta. Esse efeito pode ser visto na Fig. 5.7(a), em que para $v' = 0.6$ ($v = 182.6 \text{ m/s}$) existem dois skyrmions, havendo assim uma transição de fase topológica em que a carga total da rede muda. Essa velocidade determina uma configuração de auto-campo crítico, suficiente para mudar a carga

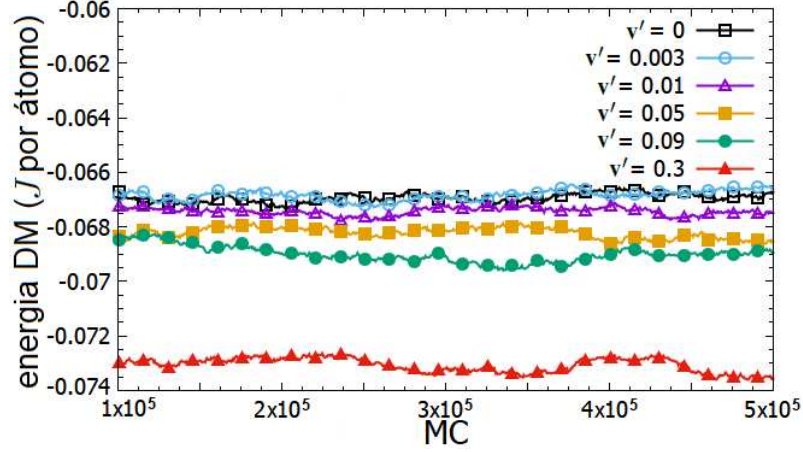


Figura 5.6: Energia Dzyaloshinskii-Moriya em função de v' . O módulo da energia aumenta com o aumento da velocidade, o que ocorre devido à deformação do skyrmion.

total de $Q = 1$ para $Q = 2$. Isso implica que os elementos da não diagonal da massa total do sistema são dobrados, segundo a Eq. 5.6.

Já as correntes necessárias para produzir as velocidades citadas podem ser calculadas como [111]

$$j \approx v \frac{\Delta\rho_{xy}^\infty}{\Delta\rho_{xy}} 1.2 \times 10^{10} \text{ s A/m}^3, \quad (5.9)$$

em que $\Delta\rho_{xy}^\infty \approx -3 \times 10^{-11} \Omega\text{m}$ e $\Delta\rho_{xy} \approx 4 \times 10^{-11} \Omega\text{m}$. Portanto, a velocidade crítica para o aumento do número de skyrmions corresponde a $1.37 \times 10^{12} \text{ A m}^{-2} < j < 1.64 \times 10^{12} \text{ A m}^{-2}$, aproximadamente. O aumento do número de skyrmions na rede para altos valores de densidade de corrente, bem como estimada acima, foi observado previamente [112].

Como os skyrmions resultantes continuam se movimentando na rede, e por isso devem ser deformados, também podemos fazer a análise dos elementos da diagonal da massa total do sistema. Para $v' = 0.6$ as simulações mostram o termo dissipativo total da rede como $\mathcal{D}_{x,x} = 25.6$ e $\mathcal{D}_{y,y} = 39.2$. Assumindo que os dois skyrmions tenham mesma massa, cada skyrmion tem uma contribuição de massa de $\mathcal{M}_{x,x} = 12.8$

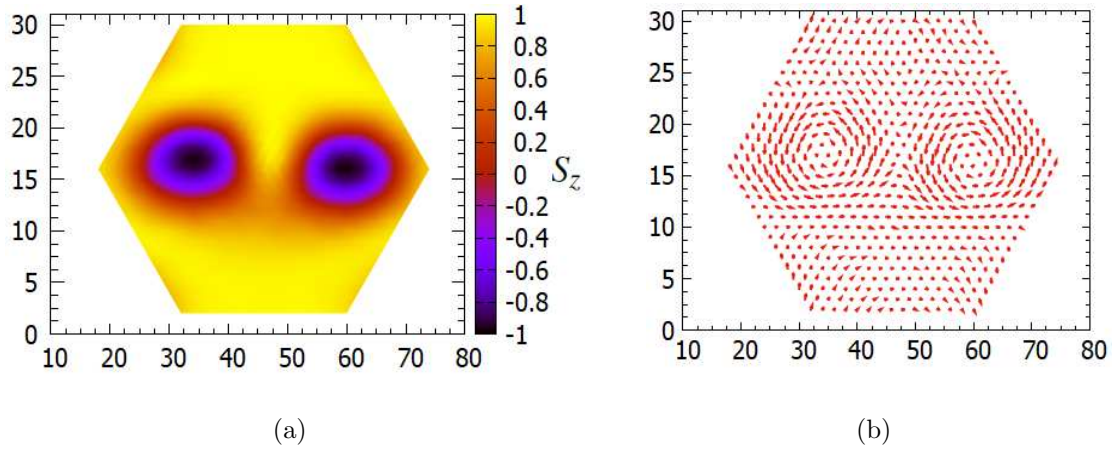


Figura 5.7: (a) Componente S_z dos skyrmions na rede para $\mathbf{v}' = 0.6$. A velocidade de transição está entre $0.5 > \mathbf{v}' \geq 0.6$. (b) Campo vetorial dos skyrmions deformados para a constante $\mathbf{v}' = 0.6$.

e $\mathcal{M}_{y,y} = 19.6$. Essa assimetria entre os dois elementos mostra que cada skyrmion possui uma massa equivalente à de um skyrmion deformado. Ou seja, acima de uma velocidade crítica, além de haver o aumento da quantidade de skyrmions, relacionada a uma transição de fase topológica, há também a deformação de ambos. Já a Fig. 5.7(b) mostra o campo vetorial associado aos dois skyrmions formados. Nela, podemos ver que o sentido de rotação dos skyrmions são iguais, e idêntico ao sentido de rotação para um único skyrmion (Fig. 5.2(b)). Se após a transição de fase topológica os skyrmions passem a ter velocidade nula, $\mathbf{v}' = 0$, o sistema não volta ao estado original em que existia somente um skyrmion, não havendo uma nova transição de fase. Porém, apesar de em maior quantidade, nesse regime os skyrmions não ficam mais deformados, possuindo os elementos de massa da diagonal principal simétricos. Isso ocorre pois, como todos os skyrmions se movem à mesma velocidade, cada um produz seu próprio auto-campo que é responsável pela sua própria deformação. Quando a velocidade vai a zero, o auto-campo não mais existe e o skyrmion deixa de ficar deformado. Já para velocidades muito altas ($\mathbf{v}' = 2.0$, por exemplo) há a destruição do skyrmion.

Podemos também estudar a influência do tamanho da rede na quantidade de skyrmions após a transição de fase. As simulações mostram que o tamanho da rede limita a quantidade de skyrmions, e quanto maior a rede maior a quantidade de skyrmions. Para uma rede com 15 sítios por aresta há um limite de número de skyrmions, com um total de 2, bem como pode ser visto na Fig. 5.7(a). Já uma rede com 30 sítios por aresta, e $\mathbf{v}' = 0.8$, há uma limitação na quantidade de skyrmions bem como pode ser visto na Fig. 5.8. Cada skyrmion possui um próprio auto-campo gerado, devido a sua velocidade, que é suficiente tanto para deformá-lo quanto para multiplicá-lo sucessivamente, até que a rede limite o processo. Em todos os casos, se a velocidade for levada a zero os skyrmions formados não se reagrupam, formando um único skyrmion. Os mesmos se mantêm, mas sem deformação.

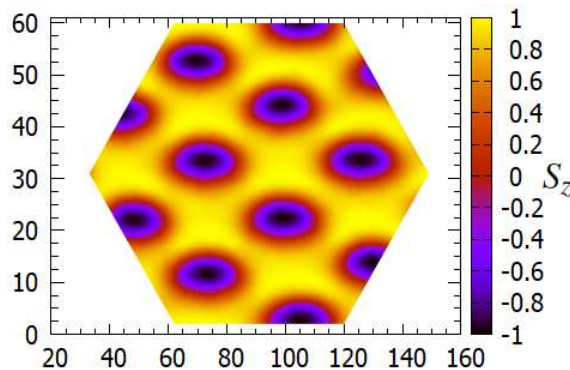


Figura 5.8: Rede com 30 sítios por aresta e $\mathbf{v}' = 0.8$. Há o aumento do número de skyrmions em quantidade tanto quando a rede permite. Os skyrmions da rede se mantêm deformados enquanto houver velocidade não nula.

Nesse capítulo encontramos a relação entre a massa do skyrmion e sua velocidade, através da sua deformação devido ao seu movimento. Mostramos que, acima de uma velocidade crítica, a quantidade de skyrmions na rede aumenta, sendo que o número de skyrmions depende do tamanho da rede. Estes resultados foram desenvolvidos durante o curso de Doutorado em Física Aplicada da Universidade Federal de Viçosa e estão em fase final de redação, sendo partes deste capítulo traduções livres desse texto [113].

Capítulo 6

Configuração Magnética em Nanocasca Toroidal

6.1 Introdução

Neste capítulo, nosso foco é o estudo de propriedades de uma casca magnética toroidal. Como já foi discutido, o mais simples toro de *genus* 1 é uma geometria em forma de anel, que lembra um *donut*. Essa geometria é descrita usando um sistema de coordenadas esféricas, definido como

$$x = \mathcal{Z} \cos(\varphi) , \quad y = \mathcal{Z} \sin(\varphi) , \quad z = r \cos(\theta) , \quad (6.1)$$

onde $\mathcal{Z} = R + r \sin(\theta)$, R e r são os raios externo e interno, respectivamente, e ϕ e θ definem os ângulos azimutal e polar, como mostrado na Fig. 6.1. O conjunto de equações acima permite descrever três diferentes tipos de toro: o toro anel ($R > r$), o toro chifre ($R = r$) e o interessante toro do fuso ($R < r$). Além disso, podemos notar que fazendo $R = 0$, o sistema de coordenadas descreve a geometria de uma esfera com o raio igual à r .

Na perspectiva de um modelo micromagnético contínuo, o perfil de magnetização pode ser escrito como uma função contínua em uma base local, $(\hat{r}, \hat{\theta}, \hat{\varphi})$, de tal forma que $\mathbf{M} = M_s \mathbf{m}(\theta, \varphi) \equiv M_s \mathbf{m}$, onde M_s é a magnetização de saturação e

$$\mathbf{m} = \hat{r} \cos \Theta + \hat{\theta} \sin \Theta \cos \Phi + \hat{\varphi} \sin \Theta \sin \Phi . \quad (6.2)$$

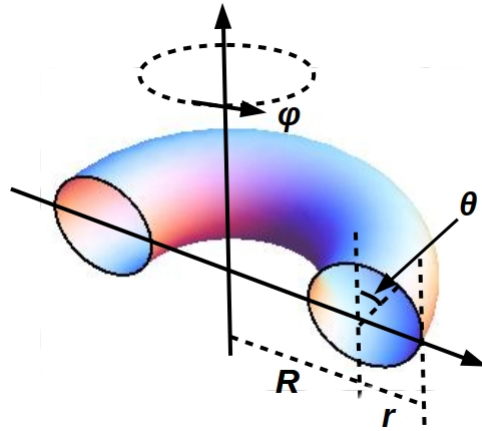


Figura 6.1: Geometria toroidal e parâmetros que descrevem uma casca toroidal. R e r são os raios externos e internos, respectivamente, e φ e θ ($\in [0, 2\pi)$) são os ângulos azimutal e polar, respectivamente.

Aqui, $\Theta \equiv \Theta(\theta, \varphi)$ e $\Phi \equiv \Phi(\theta, \varphi)$ descrevem os ângulos esféricos polar e azimutal do vetor de magnetização na base local.

Nesse trabalho, consideraremos que a energia magnética de qualquer estrutura é dada por $E_m = \mathcal{E}_{ex} + \mathcal{E}_a$, onde \mathcal{E}_{ex} e \mathcal{E}_a são as contribuições de troca e anisotropia na superfície, respectivamente. A anisotropia na superfície pode ser visualizada como uma simplificação do cálculo da energia magnetostática, baseada no fato da energia volumétrica magnetostática poder ser negligenciada, no regime onde a espessura do tubo é pequena, e a energia superficial magnetostática pode ser capturada pela inclusão de uma anisotropia superficial *ad hoc* [67,90]. A magnitude dessa penalidade energética pode ser estimada pela energia associada a um capacitor com densidade de carga proporcional à carga magnética local ($\sigma = \mathbf{M} \cdot \mathbf{n}$). A energia global pode ser calculada acumulando-se a contribuição de capacitores infinitesimais, negligenciando suas interações. Por outro lado, a energia de troca pode ser obtida do modelo desenvolvido em um trabalho recente de Gaididei *et al.* [67], em que os autores mostram que quando o vetor magnetização é parametrizado na base de uma casca magnética fina curvada, a densidade de energia de troca de uma superfície arbitrária

pode ser escrita como

$$\mathcal{E}_{ex} = (\nabla \mathbf{m})^2 = \left[\sin \Theta (\nabla \Phi - \Omega) - \cos \Theta \frac{\partial \Gamma(\Phi)}{\partial \Phi} \right]^2 + [\nabla \Theta - \Gamma(\Phi)]^2, \quad (6.3)$$

onde $\Gamma(\Phi)$ é uma matriz dependente das curvaturas de Gauss e média do nanomagnetito e Ω é a conexão de spin modificada [67, 91]. Usando a parametrização dada na Eq. (6.1) e as definições de $\Gamma(\Phi)$ e Ω dadas em Ref. [67] (Veja o Apêndice C para mais detalhes), temos que

$$\Gamma(\Phi) \equiv \Gamma = -\frac{\hat{\theta}}{r} \cos \Phi - \hat{\varphi} \frac{\sin \theta}{\mathcal{Z}} \sin \Phi, \quad (6.4)$$

e

$$\Omega = -\frac{\cos \theta}{\mathcal{Z}} \hat{\varphi}. \quad (6.5)$$

Baseado nisso, o funcional energia magnética de uma nanocasca ferromagnética é bem descrita por

$$E[\mathbf{M}] = h \int_S [\ell^2 \mathcal{E}_{ex} + \lambda (\mathbf{M} \cdot \mathbf{n})^2] dS, \quad (6.6)$$

onde $\ell \equiv \sqrt{A/(4\pi M_s^2)}$ é o comprimento de troca, h é a espessura da casca magnética, pequena suficiente para garantir magnetizações uniformes ao longo da espessura, i.e. $\mathbf{m} = \mathbf{m}(\theta, \varphi)$, dS é o elemento de superfície, A é a constante de troca e λ é o coeficiente normalizado de anisotropia.

6.2 Configurações de Mínima Energia

Usando a expressão (6.3) para a energia de troca, iremos analisar as soluções estáticas para o caso de uma anisotropia na superfície ($\lambda > 0$), forte o suficiente para providenciar uma quasi-tangencial distribuição de magnetização. Contudo, algumas considerações sobre a configuração puramente na superfície devem ser feitas. Uma configuração de magnetização tangencial pode ser obtida assumindo $\Theta = \pi/2$ e

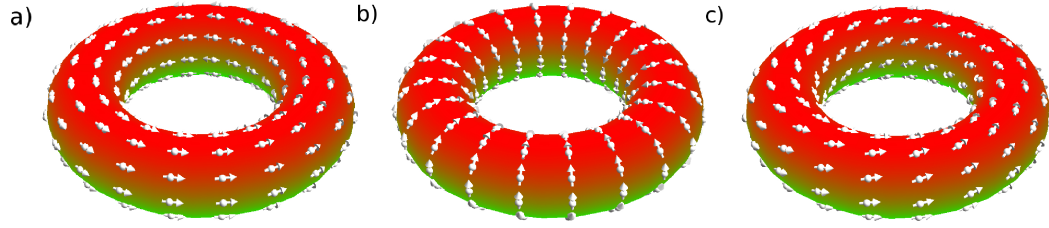


Figura 6.2: Três configurações representando estados na superfície. Figuras a, b e c representam respectivamente um vórtice toroidal ($\alpha = \pi/2$), um vórtice poloidal ($\alpha = 0$) e um estado tipo-tokamak com $\alpha = \pi/4$.

$\Phi = \alpha$, onde α é constante. O perfil de magnetização para um α arbitrário é chamado configuração tipo-tokamak (TK) enquanto configurações para $\alpha = \pi/2$ e $\alpha = 0$ são chamadas vórtice toroidal (VT) e vórtice poloidal (VP), respectivamente. Na Fig. 6.2 representamos os perfis de configuração de VT, VP e TK para $\alpha = \pi/4$. Uma configuração de magnetização puramente tangencial é então escrita como $\mathbf{m} = \hat{\theta} \cos(\alpha) + \hat{\varphi} \sin(\alpha)$ e a densidade de energia de magnetização dada na Eq. (6.3) é reduzida a $\mathcal{E}^t = \Gamma^2 + (\nabla\Phi - \Omega)^2$, e é calculada como

$$\mathcal{E}_{ex} = \frac{\cos^2 \alpha}{r^2} + \frac{\sin^2 \alpha \sin^2 \theta}{Z^2} + \frac{\cos^2 \theta}{Z^2}. \quad (6.7)$$

Assim a energia de troca do estado na superfície é dado por

$$E_{ex} = 4\pi^2 \ell^2 L \left[\frac{p}{1 + \sqrt{1 - p^2}} + \frac{p}{1 - p^2 + \sqrt{1 - p^2}} \sin^2 \alpha + \frac{1}{p} \cos^2 \alpha \right], \quad (6.8)$$

onde $p = r/R$ é a variável que permite obter o diagrama de fases mostrando a estabilidade dos estados de superfície em função de α . Nossos resultados para p são mostrados na Fig. 6.3, evidenciando que a energia de troca do estado TK é maior que dos estados VT ou VP para qualquer p . De fato, podemos notar que para $p \lesssim 0.87$, a energia de troca é minimizada para um estado VT. Contudo, quando $p \approx 0.87$, qualquer valor de α , e conseqüentemente qualquer orientação de

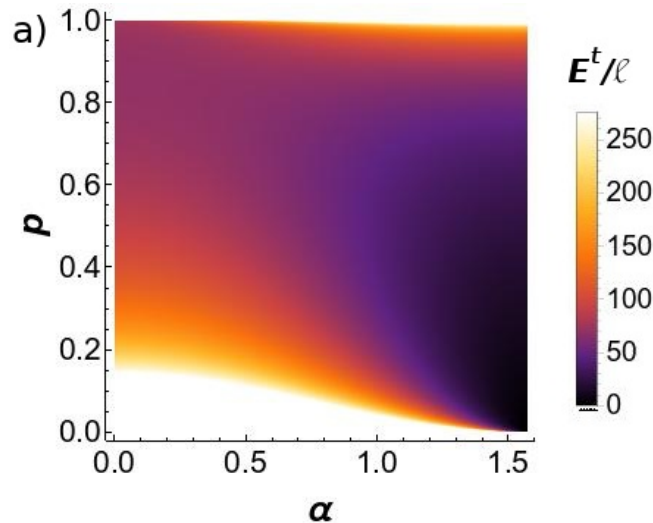


Figura 6.3: A Figura mostra o gráfico de densidade da energia de troca de um estado na superfície em função de α e p . Cores escuras representam menores valores de energia.

magnetização do estado na superfície, minimiza a energia de troca. Mesmo assim, estados TK podem minimizar a energia de troca somente nesta proporção específica de nanotoro. A energia de troca do estado VP começa a ser menor que no estado VT mesmo quando $p \gtrsim 0.87$.

Contudo, a minimização da energia de troca não garante a minimização da energia total. De fato, diferente da configuração VT, e apesar de não haver cargas magnéticas na superfície, o estado VP apresenta contribuição dipolar na energia total devido às cargas magnéticas volumétricas, formalmente definido como $\sigma = \nabla \cdot \mathbf{m}$. Portanto, essa contribuição pode ser levada em consideração a fim de determinar o perfil da magnetização na superfície que minimiza a energia total. Nesse contexto, realizamos cálculos micromagnéticos para determinar a energia total de cada estado no toro permalloy. Esses cálculos consideram, explicitamente, a interação magnetostática ao invés de uma anisotropia na superfície, de tal forma que a energia total é dada pela soma das energias de troca e dipolar. Para o permalloy usamos valores

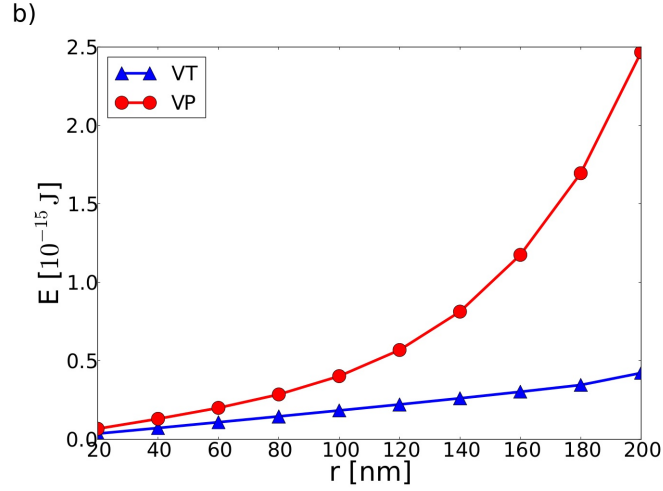


Figura 6.4: Energia total dos estados VT (azul) e VP (vermelho) para $R = 200$ nm em função de r .

típicos de $A = 13$ pJ/m, $M_s = 0.84$ MA/m, e uma constante de amortecimento de 0.5.

Nossos resultados são resumidos na Fig. 6.4. Pode-se notar que apesar da configuração VP exibir a menor energia de troca para $r/R \gtrsim 0.87$, apresenta a maior energia total devido à contribuição dipolar. Nesse contexto, se considerarmos puramente estados na superfície, o estado VT é a configuração de menor energia para qualquer razão em uma nanopartícula toroidal.

6.2.1 Núcleo de Vórtice

As soluções apresentadas acima não consideram que existam componentes da magnetização apontando ao longo da direção para fora da superfície. Então, visando determinar possíveis desvios do estado puramente na superfície em um nanotoro magnético, utilizamos teoria contínua na qual a densidade de magnetização pode ser escrita como

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{M} = M_z(\theta, \varphi)\hat{z} + M_\varphi(\theta, \varphi)\hat{\varphi}, \quad (6.9)$$

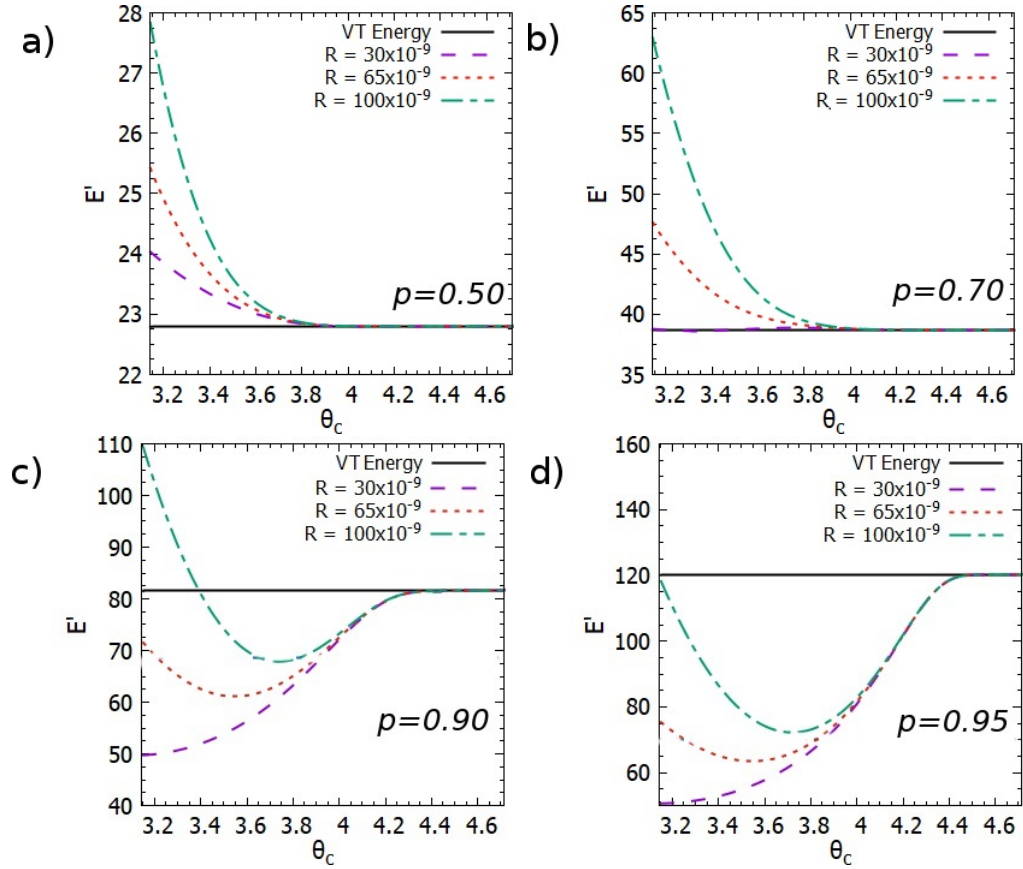


Figura 6.5: Energia magnética dos estados magnéticos considerados. Aqui, apresentamos as energias para $r/R = 0.50$ (a), $r/R = 0.70$ (b), $r/R = 0.90$ (c) e $r/R = 0.95$ (d).

onde $M_z^2 + M_\phi^2 = M_S^2$, com M_S sendo a magnetização de saturação.

Um possível desvio do estado na superfície pode ser obtido em analogia a pontos planos [93] ou curvados [50], nos quais a componente do estado de vórtice fora do plano aparece na forma de um núcleo (NV). Essa configuração pode ser bem descrita por $\mathbf{m} = \Omega_z \hat{z} + \Omega_\phi \hat{\phi}$, onde $\Omega_\phi = \sqrt{1 - \Omega_z^2}$. O perfil $\Omega_z = [1 - (\rho/\rho_c)^2]^4$ descreve um núcleo de vórtice, onde $\rho = \mathcal{Z}$ e $\rho_c = R + r \sin \theta_c$. O parâmetro angular θ_c descreve um ângulo poloidal crítico do qual momentos magnéticos começam a apontar ao longo da direção fora do plano.

Assumindo o campo de magnetização descrito pela Eq. (6.9), a energia de troca é dada por

$$E_{ex} = L\ell^2 \int \left[\frac{1}{r^2(1 - \Omega_z^2)} \left(\frac{\partial \Omega_z}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1 - \Omega_z^2}{Z^2} \right] dS. \quad (6.10)$$

A energia de anisotropia será calculada numericamente assumindo $\lambda = 1/4$ [49]. Na Fig. 6.5 apresentamos as energias magnéticas para cada estado magnético para diferentes razões. Nessa figura, observamos que para $p \leq 0.7$ (toro fino) a configuração VT minimiza a energia magnética para qualquer parâmetro geométrico da casca toroidal. Por outro lado, devido ao aumento na energia de troca na configuração TV quando p aumenta, configurações NV se tornam estados de menor energia quando $p > 0.75$ nm (Figs. 6.5.b, 6.5.c e 6.5.d). Em particular, como o custo de energia de troca para manter momentos magnéticos paralelos à superfície na região com curvatura negativa do toro é muito alto, os estados NV são altamente estáveis e θ_c aumenta com R (ver Figs. 6.5.c e 6.5.d).

A fim de corroborar com nossos resultados analíticos, realizamos simulações micromagnéticas usando software OOMMF [94] em um nanotoro de Py. Geometrias simuladas consistem em um nanotoro com raios externo e interno variando de 20 a 200 nm, e a espessura da casca magnética de 0.2 vezes o raio interno. Na Fig. 6.6, observamos o estado NV, e a região de núcleo em detalhes para um nanotoro com $R = 100$ nm e $r = 99$ nm.

A simulação micromagnética realizada, bem como os cálculos analíticos, nos permitem construir um diagrama de estados que mostra o estados de menor energia em uma casca magnética toroidal como função dos parâmetros geométricos r e R . A partir de análises da Fig. 6.7, é possível notar que existe uma linha reta que divide as regiões em que VT e NV são estáveis. Cálculos analíticos são representados por regiões contínuas, enquanto simulações micromagnéticas são representadas por pontos. A região preta indentifica os parâmetros geométricos do toro permitindo um estado magnético do tipo VT, enquanto a região amarela representa o estado NV que

minimiza a energia magnética em determinadas condições. O surgimento do estado NV como estado fundamental para $r/R \geq 0.8$ é um resultado do aumento na energia de troca do estado NV quando $r \rightarrow R$. Vale mencionar que, apesar de termos obtido um bom acordo entre cálculos analíticos e simulações micromagnéticas, efeitos de discretização e espessura da geometria simulada leva ao aparecimento de pequenos desvios na inclinação da linha que define a transição entre os estados NV e VT. De fato, a linha obtida entre a transição entre os estados VT e NV por simulações micromagnéticas é representada por pontos vermelhos. Além disso, no diagrama de estados obtido não consideramos parâmetros geométricos de nanopartículas toroidais que permitem estados de cebola como configuração de mínima energia [49, 66].

Nesse capítulo encontramos as configurações magnéticas estáveis de uma nanocasca toroidal, através de cálculos analíticos e simulações micromagnéticas. Mostramos as energias magnéticas dos estados considerados em função da razão entre os raios externo e interno da nanocasca, bem como o diagrama de fases em função dos mesmos parâmetros. Estes resultados foram desenvolvidos durante o curso de Doutorado em Física Aplicada da Universidade Federal de Viçosa e publicados na revista *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* pelos autores A.W. Teixeira, S. Castillo-Sepúlveda, S. Vojkovic, J.M. Fonseca, D. Altbir, Á.S. Núñez e V.L. Carvalho-Santos, sendo este capítulo uma tradução livre desse artigo [114].

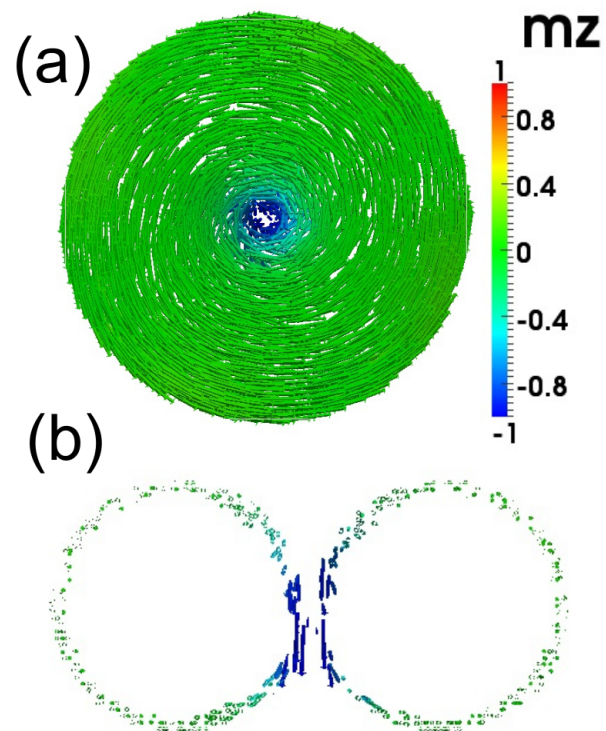


Figura 6.6: Fig. (a) mostra o campo de magnetização obtido através de simulações micromagnéticas para um nanotoro com $R = 100$ nm e $r = 99$ nm, vistos de cima. Fig. (b) apresenta a seção transversal no centro do nanotoro a fim de mostrar as componentes da magnetização apontando ao longo da direção fora do plano.

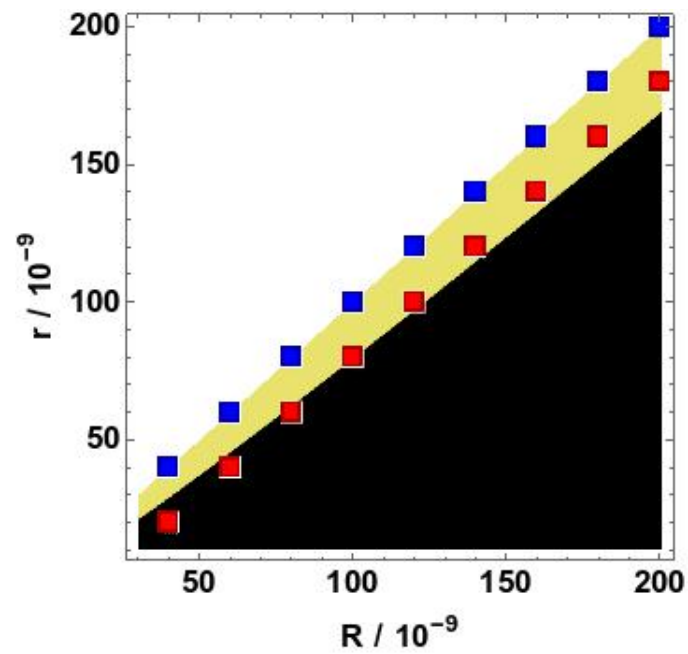


Figura 6.7: Diagrama de fases mostrando a configuração do estado fundamental em função dos parâmetros geométricos que descrevem o nanotoro magnético. Preto e amarelo são regiões que representam, respectivamente, configurações VT e NV. Pontos vermelhos mostram a linha de transição entre estados VT e NV obtido através de simulações micromagnéticas. Pontos azuis ilustram resultados de simulações micromagnéticas para a auto-interseção do toro.

Capítulo 7

Conclusões e Perspectivas

7.1 Conclusões

Um novo estado da matéria, diferente de outros estados então conhecidos, proporcionou um maior entendimento sobre sistemas físicos e matemáticos. Aqueles chamados estados topológicos compreendem sistemas que ferem os paradigmas de Landau, principalmente ao apresentarem diferentes fases com mesmas simetrias. Supercondutores topológicos, que apresentam a emergência de férmions de Majorana, isolantes topológicos, em que supercondutividade pode ser induzida, produzindo estados de supercondutividade topológica, e algumas estruturas magnéticas, são exemplos de materiais com tal ordenamento.

Férmions de Majorana são partículas que são suas próprias antipartículas, que foram previstas teoricamente, cuja detecção experimental se dá através de sua emergência em sistemas supercondutores. Essas partículas emergem devido à superposição entre os graus de liberdade dos estados eletrônicos e de buracos. Sua utilização em computação quântica e transporte termoelétrico tem se mostrado promissora e estudada intensivamente nos últimos anos.

Esses sistemas, nas condições de surgimento de férmions de Majorana espacialmente separados e em modo zero de energia, apresentam uma fase topologicamente não trivial. Para que isso ocorra, um sistema unidimensional deve obedecer ao

critério de Kitaev, que determina o invariante topológico associado, o número de Majorana.

O sistema mais simples conhecido, que obedece ao critério de Kitaev e favorece a emergência de férmions de Majorana, é chamado de cadeia de Kitaev. Além desse, isolantes topológicos 2D também fornecem as condições necessárias para emergência de férmions de Majorana, uma vez que obedecem ao critério de Kitaev e supercondutividade pode ser induzida nos mesmos.

No Capítulo 2, partindo da Hamiltoniana respectiva à cadeia de Kitaev, calculamos o potencial efetivo para os férmions de Majorana através de técnicas de teoria de campos, em que foi realizada uma integral Gaussiana na representação do tempo complexo para se encontrar a função de partição dos férmions de Majorana. Através do potencial efetivo, mostramos que seu mínimo, com respeito ao parâmetro supercondutor, descreve o diagrama de fases qualitativo para a supercondutividade, em que Δ possui valor finito para temperatura nula e decresce a zero à medida que a temperatura aumenta. Também calculamos o número de partículas do sistema, em que foi possível ver como uma densidade eletrônica e de buracos devem coexistir no espaço dos momentos para favorecer o surgimento de modo zero de férmions de Majorana espacialmente separados.

Usando técnicas análogas, mas partindo da Hamiltoniana para supercondutividade induzida na superfície de um isolante topológico tridimensional, no Capítulo 3 calculamos o potencial efetivo dos férmions de Majorana que depende, principalmente, da forma do parâmetro supercondutor. No caso de um parâmetro de onda s , mostramos que a equação de *gap* é igual àquela encontrada para sistemas eletrônicos de Dirac supercondutores quasi-2D. Já para um parâmetro de onda p , mostramos que o potencial efetivo leva a uma transição quântica em temperatura nula dependente da interação eletrônica supercondutora e de parâmetros do IT. Isso caracteriza em quais condições supercondutividade será induzida na superfície do IT. Além disso, encontramos o diagrama de fases característico mostrando o desaparecimento da

supercondutividade à medida que a temperatura aumenta [77]

Como os resultados para onda s são equivalentes aos para sistemas eletrônicos de Dirac supercondutores quasi-2D, é possível que tais sistemas também apresentem a emergência de férmions de Majorana. Supercondutividade de alta temperatura crítica em cupratos, por exemplo, pode ser explicada assumido o sistema descrito acima, que pode ser tratado com o conhecido modelo de spin-férmion, candidato a explicar supercondutividade de alta temperatura. Sob essa motivação, no Capítulo 4 mostramos como férmions de Majorana emergem nos planos de CuO_2 de cupratos supercondutores, e em quais condições isso ocorre. A emergência ocorre quando o material apresenta estado supercondutor, que ocorre quando o mesmo é dopado com elétrons ou buracos, em que μ deve depender do *gap* de carga isolante [100].

Sistemas magnéticos também são capazes de produzir configurações com características topológicas não triviais. Um exemplo de sistema promissor são redes de spin que possuem, principalmente, interação de Dzyaloshinskii-Moriya e são capazes de gerar configurações do tipo skyrmions, que são configurações circulares, simétricas e planares do tipo vórtices.

No Capítulo 5, através de simulações de Monte Carlo, encontramos configurações do tipo skyrmion se deslocando em diferentes velocidades. De acordo com essa velocidade, um auto-campo é gerado e, somado ao campo externo aplicado, gera um campo efetivo que deforma o skyrmion. Segundo a equação de Thiele, o skyrmion possui uma matriz de massa associada, que depende da sua própria velocidade e deformação.

Para velocidade nula, o skyrmion formado é simétrico e as componentes da diagonal da matriz massa são equivalentes, tal que $\mathcal{M}_{x,x} = \mathcal{M}_{y,y} \approx 4.78\pi$, em acordo com o esperado. Para velocidades muito baixas, menores que $\mathbf{v} = 27.4\text{m/s}$, o auto-campo é pequeno em relação às interações competidoras e a massa do skyrmion se mantém praticamente constante, devido a sua insignificante deformação. Para velocidades superiores a $\mathbf{v} = 27.4\text{m/s}$, o auto-campo gerado possui módulo comparável

às demais interações competidoras e a deformação do skyrmion se torna relevante. Com isso, as componentes da massa se tornam diferentes, sendo que $\mathcal{M}_{x,x}$ diminui com o aumento da velocidade, enquanto $\mathcal{M}_{y,y}$ aumenta. Caso o mecanismo que possibilita o skyrmion ter velocidade seja desligado, o mesmo volta ao estado original não deformado.

Já a parte não diagonal da massa total na rede, que depende da carga topológica do skyrmion, se mantém constante independentemente da deformação, mas sofre mudança para velocidades acima de uma velocidade crítica, que está entre $152.2 \text{ m/s} > \mathbf{v} \geq 182.6 \text{ m/s}$. Acima dessa velocidade, o skyrmion se multiplica em quantidade dependente do tamanho da rede, alterando assim a carga topológica total da rede. Enquanto a velocidade se mantém não nula, todos os skyrmions são deformados. Caso a velocidade vá a zero, o sistema não retorna ao estado original de um skyrmion, mas nessas condições os skyrmions não são mais deformados [113].

Além disso, estudamos a interação Dzyaloshinskii-Moriya por sítio em função da velocidade. Com a deformação do skyrmion, de acordo com o aumento da velocidade, é esperado que a interação Dzyaloshinskii-Moriya mude. De fato, há o aumento do módulo dessa energia à medida que a velocidade aumenta.

Também analisamos propriedades magnéticas estáticas de uma nanocasca toroidal através de cálculos analíticos e simulações micromagnéticas no Capítulo 6. A comparação entre a energia de troca e diferentes estados na superfície tem mostrado que a configuração de magnetização com momentos magnéticos, apontando ao longo da direção azimutal (VT), é altamente estável. A configuração com os momentos magnéticos apontando ao longo da direção do tipo polar (VP) é estável somente quando a razão $p = r/R \gtrsim 0.87$. Mesmo assim, a grande energia dipolar do estado VP faz esse estado instável e o estado VT é aquele na superfície que minimiza a energia magnética para qualquer parâmetro geométrico da casca toroidal magnética.

Também consideramos configurações magnéticas em que os momentos magnéticos apontam ao longo da direção fora da superfície. Nossos resultados mos-

tram que nanopartículas magnéticas toroidais podem apresentar uma configuração magnética que lembra um vórtice com um núcleo (NV). Foi mostrado que o estado NV aparece como o estado magnético fundamental para $p \gtrsim 0.75$. Também foi mostrado que a componente da magnetização apontando ao longo da direção fora da superfície aumenta com p [114].

7.2 Perspectivas

Os estudos de sistemas topológicos supercondutores, bem como a detecção de férmions de Majorana, são recentes. Os potenciais efetivos calculados auxiliam em sua consolidação e entendimento, uma vez que descrevem corretamente a fenomenologia experimental dos supercondutores. Podem ser usados para o cálculo de outras propriedades termodinâmicas e em simulações computacionais, que proporcionam o estudo, uso e criação de novas tecnologias. As técnicas usadas se mostraram eficientes e podem ser estendidas a outros sistemas.

A pesquisa de supercondutividade topológica de alta temperatura crítica, de fato, é recente e pode tornar a manipulação de férmions de Majorana mais simples e efetiva. Nesse trabalho mostramos os estados de modo zero de Majorana. A partir disso, deve-se entender de que modo férmions de Majorana surgem nos planos, como realizar sua detecção experimental e como podem ser usados em computação quântica, por exemplo.

Por outro lado, os resultados para skyrmions mostram como as componentes de massa variam de acordo com sua velocidade. Esse efeito possivelmente afeta a dinâmica do skyrmion, em que o efeito Hall é presente. Estudos futuros sobre sua dinâmica, portanto, podem ser feitos.

Já a possibilidade de obter um estado NV em nanopartículas toroidais é um resultado muito interessante. De fato, a presença de tal componente pode permitir a manipulação de nanopartículas toroidais através do campo magnético externo. Logo, tal sistema pode ser usado como um recipiente para entrega de medicamentos [95]

e tratamento de câncer por hipertermia intracelular [96].

Apêndice A

A função de partição para sistemas quânticos

Em mecânica estatística, a função de partição é definida como a soma sobre todos os estados microscópicos acessíveis, j , de um sistema [115], tal que

$$\mathcal{Z} = \sum_j e^{-\beta E_j}, \quad (\text{A.1})$$

que possui dependência da temperatura, $\beta = 1/T$, e dos níveis de energia E_j . Com a função de partição, é possível realizar a conexão entre tais estados com a energia livre do sistema, ou “potencial efetivo”, através da expressão

$$V_{eff} = \frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}, \quad (\text{A.2})$$

além de possibilitar a obtenção de propriedades importantes, tais como entropia e número de partículas.

Para sistemas quânticos, a matriz densidade de estados pode ser definida como

$$\rho = e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (\text{A.3})$$

em que \mathcal{H} é o operador correspondente à Hamiltoniana do sistema associada ao potencial termodinâmico adotado. Assim, a função de partição pode ser definida como a soma sobre os valores esperados da forma

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} \rho = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}. \quad (\text{A.4})$$

Podemos ainda reescrever o traço matriz densidade, usando o formalismo de Dirac, tal que

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}\rho = \int d\phi_0 \langle \phi_0 | e^{-\beta\mathcal{H}} | \phi_0 \rangle, \quad (\text{A.5})$$

em que $|\phi_0\rangle$ denota o estado do sistema.

Por outro lado, a amplitude de probabilidade de um sistema que está no estado no tempo $|\phi_0\rangle$ e no tempo t_0 ser encontrado no estado $|\phi_1\rangle$ e no tempo t_1 , em que ϕ é a variável de campo, pode ser escrita como a integral funcional

$$\langle \phi_0 | e^{-it\mathcal{H}} | \phi_1 \rangle = A \int D\phi e^{-iS}, \quad (\text{A.6})$$

em que A é uma constante de normalização, $t = t_1 - t_0$ e S é a ação, que depende da densidade de Lagrangiana \mathcal{L} da forma

$$S = \int_{t_0}^{t_1} dt \int d\mathbf{x} \mathcal{L}. \quad (\text{A.7})$$

Podemos agora relacionar a Eq.(A.5) com a soma sobre todos os caminhos da Eq.(A.6), à fim de se obter a formulação da função de partição no contexto quântico. Se assumirmos o sistema em equilíbrio termodinâmico, podemos identificar a variável de tempo com a variável de temperatura, fazendo $t = -i\beta$ [116]. Essa identificação pode ser feita assumindo-se que

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \pm\phi(\mathbf{x}, \beta), \quad (\text{A.8})$$

em que o sinal positivo é respectivo à bósons e o negativo à férmions. A correlação entre tempo e temperatura também pode ser visualizada através de uma rotação de Wick, que substitui β pelo tempo imaginário $\tau = it$, ou ainda pela verificação da periodicidade da função de Green do sistema [76].

Dessa forma, a função de partição de um sistema quântico pode ser escrita como uma integral funcional na representação do tempo complexo da forma

$$\mathcal{Z} = \int d\phi_0 \langle \phi_0 | e^{-\beta\mathcal{H}} | \phi_0 \rangle = A \int D\phi e^{S_q}, \quad (\text{A.9})$$

em que

$$S_q = \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \mathcal{L} = \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \left(\phi^\dagger i\partial_t \phi - \mathcal{H} \right). \quad (\text{A.10})$$

Apêndice B

Soma sobre as frequências de Matsubara

Pretendemos realizar a soma sobre as frequências de Matsubara, ω_n , da Equação (2.26), que é

$$\sum_n \ln \left[\beta^2 \left(\omega_n^2 + |D|^2 \right) \right]. \quad (\text{B.1})$$

Com esse propósito, reescrevemos o logaritmo natural acima como uma integral genérica, em que ω_n é reescrito, explicitando n ,

$$\sum_n \ln \left[\beta^2 \left(\omega_n^2 + |D|^2 \right) \right] = \sum_n \left\{ \int_1^{-\beta|D|} \frac{2x}{x^2 + (2n+1)^2 \pi^2} dx + \ln \left[1 + (2n+1)^2 \pi^2 \right] \right\}. \quad (\text{B.2})$$

O termo do integrando é resultado de um conhecido somatório sobre n

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{x^2 + (2n+1)^2 \pi^2} = \frac{1}{x} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{e^x + 1} \right), \quad (\text{B.3})$$

que, substituído na Equação (B.2) leva a

$$\begin{aligned} \sum_n \ln \left[\beta^2 \left(\omega_n^2 + |D|^2 \right) \right] &= 2 \int_1^{-\beta|D|} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{e^x + 1} \right) dx \\ &+ \sum_n \ln \left[1 + (2n+1)^2 \pi^2 \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Termos constantes, independentes de β , μ e Δ são irrelevantes para as análises e podem ser desconsiderados. Resolvendo a integral acima e eliminando tais termos, temos o resultado para a soma sobre as frequências de Matsubara

$$\sum_n \ln \left[\beta^2 (\omega_n^2 + |D|^2) \right] = 2 \left[\frac{\beta |D|}{2} + \ln (1 + e^{-\beta |D|}) \right]. \quad (\text{B.5})$$

Apêndice C

Operadores momento em coordenadas polares

No Capítulo 4 tratamos dos operadores momento $k_{\pm} = k_y \pm ik_x$, em que $k_j = -i(\partial/\partial x_j)$ com $x_j = \{x, y\}$.

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta}; \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta}.\end{aligned}\tag{C.1}$$

O objetivo aqui é reescrever os operadores em coordenadas polares. Para isso, usamos

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \theta = \tan\left(\frac{y}{x}\right),\tag{C.2}$$

que implica nas relações

$$\begin{aligned}\frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \frac{r \cos(\theta)}{r} = \cos(\theta); \\ \frac{\partial r}{\partial y} &= \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \frac{r \sin(\theta)}{r} = \sin(\theta).\end{aligned}\tag{C.3}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \cos(\theta) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta}; \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta}.\end{aligned}\tag{C.4}$$

Por fim, os operadores são escritos como

$$k_{\pm} = \pm \left[\cos(\theta) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] - i \left[\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} \right]. \quad (\text{C.5})$$

Apêndice D

Propriedades Geométricas do Toro

Nesse apêndice apresentamos alguns aspectos da geometria toroidal que foi usada no texto principal. Geometricamente, um toro de genus-1 (um buraco central, descrito pela Fig. 6.1) é uma superfície compacta cuja curvatura Gaussiana varia suavemente de $1/r(R-r)$ à $+1/r(R+r)$ ao longo de seu ângulo polar, então interpola entre curvaturas pseudoesférica e esférica sempre que $R > r$. Do ponto de vista topológico, o toro mais simples de genus-1 é obtido pelo produto topológico de dois círculos, $T^1 = S^1 \wedge S^1$. Em geral, um toro de genus- n é obtido de forma similar. Um toro de genus-2, por exemplo, é obtido por $T^2 = T^1 \wedge T^1$. Um toro ordinário é a mais simples variedade fechada bi-dimensional que tem genus-1, um único buraco, como retratado na 6.1. Dependendo do tamanho relativo entre os raios interno, r , e externo, R , três tipos distintos de padrões são obtidos: anel ($R > r$), chifre ($R = r$), ou toro do fuso ($R < r$). O mais comum é o toro anel, que lembra um *donut*, que é do tipo estudado aqui, uma vez que os outros, apesar de serem matematicamente interessantes, parecem ser raros na natureza. Para descrever essa geometria existem dois sistemas de coordenadas frequentemente usados: as coordenadas toroidais e do tipo esféricas. A última relaciona o sistema Cartesiano aos ângulos toroidais polar e azimutal de forma similar à coordenadas esféricas.

Nossas convenções são baseadas na Ref. [67]. Nós consideramos uma superfície bidimensional, \mathcal{S} , imersa no espaço Euclidiano tridimensional, R^3 , com a repre-

sentação paramétrica na forma

$$\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2). \quad (\text{D.1})$$

q_α é a coordenada curvilínea local na superfície \mathcal{S} e \vec{r} é o vetor posição tridimensional, na base cartesiana $\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}$. Índices em latin, $i, j, k, \dots = 1, 2, 3$, descrevem coordenadas cartesianas e índices gregos, $\alpha, \beta, \gamma, \dots = 1, 2$, coordenadas curvilíneas. A convenção de Einstein para soma é usada onde índices repetidos são somados. Qualquer toro ordinário pode ser parametrizado, por exemplo, pelas coordenadas peripolares (θ, φ) , sendo então

$$(R - \sqrt{x^2 + y^2})^2 + z^2 = r^2, \quad (\text{D.2})$$

que é relacionado ao sistema Cartesiano por

$$\begin{cases} x = Z \cos \varphi, \\ y = Z \sin \varphi, \\ z = r \cos \theta, \end{cases} \quad (\text{D.3})$$

onde R é raio de rotação (externo), r o raio axial (interno) e os ângulos polar e azimutal são θ ($0 \leq \theta < 2\pi$) e φ ($0 \leq \varphi < 2\pi$) (ver Fig. 6.1). A definição (D.3) gera as seguintes propriedades geométricas da superfície ($(\alpha, \beta) = (\theta, \varphi) = (1, 2)$).

Base local curvilínea normalizada:

$$\hat{e}_\alpha = \frac{\vec{g}_\alpha}{|\vec{g}_\alpha|} = \frac{\partial_\alpha \vec{r}}{|\partial_\alpha \vec{r}|}, \quad \hat{n} = \hat{e}_1 \times \hat{e}_2, \quad (\text{D.4})$$

$$\begin{aligned} \hat{g}_\theta &= \hat{x}r \cos \theta \cos \varphi + \hat{y}r \cos \theta \sin \varphi - \hat{z}r \sin \theta, \\ \hat{g}_\varphi &= -\hat{x}Z \sin \varphi + \hat{y}Z \cos \varphi, \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

$$\begin{aligned} \hat{e}_\theta &= \hat{x} \cos \theta \cos \varphi + \hat{y} \cos \theta \sin \varphi - \hat{z} \sin \theta, \\ \hat{e}_\varphi &= -\hat{x} \sin \varphi + \hat{y} \cos \varphi, \\ \hat{e}_r &= \hat{x} \sin \theta \cos \varphi + \hat{y} \sin \theta \sin \varphi + \hat{z} \cos \theta. \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

Métrica $g_{\alpha\beta} = \vec{g}_\alpha \cdot \vec{g}_\beta$:

$$g_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} r^2 & 0 \\ 0 & \mathcal{Z}^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.7})$$

sendo $\sqrt{g} = r\mathcal{Z}$. a conexão de spin $\Xi_\alpha = \hat{\theta} \cdot \partial_\alpha \hat{\phi} \sqrt{g_{\alpha\alpha}}$ também chamada primeira forma fundamental:

$$\Omega = -\frac{\cos\theta}{\mathcal{Z}} \hat{\phi}. \quad (\text{D.8})$$

A segunda forma fundamental $b_{\alpha\beta} = \hat{r} \cdot \partial_\beta \vec{g}_\alpha$

$$b_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} -r & 0 \\ 0 & -\sin\theta\mathcal{Z} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.9})$$

e a matriz Hessiana é

$$h_{\alpha\beta} = -\begin{pmatrix} \frac{1}{r} & 0 \\ 0 & \frac{\sin\theta}{\mathcal{Z}} \end{pmatrix}. \quad (\text{D.10})$$

Curvatura de Gauss $\mathcal{K} = \det(h_{\alpha\beta}) = \frac{\sin\theta}{r\mathcal{Z}}$ e a curvatura média $\mathcal{H} = Tr(h_{\alpha\beta})/2$. Quando a densidade de energia de troca é parametrizada na base de uma casca fina magnética de curvatura arbitrária, veja eq. (6.3), $\Gamma(\Phi)$ aparece, um vetor dependendo das curvaturas de Gauss e média do nanomagnet. Usando a parametrização na Eq. (D.3) e as definições de $\Gamma(\Phi)$ and Ω , dados na Ref. [67], Eqs. (4) e (5) podem ser obtidas.

$$\Gamma(\Phi) = -\frac{\hat{\theta}}{r} \cos\Phi - \hat{\phi} \frac{\sin\theta}{\mathcal{Z}} \sin\Phi. \quad (\text{D.11})$$

Finalmente, os operadores diferenciais (gradiente, divergente e laplaciano) em coordenadas toroidais, são:

$$\nabla f = \frac{\hat{\theta}}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\hat{\phi}}{\mathcal{Z}} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \quad (\text{D.12})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r\mathcal{Z}} \frac{\partial}{\partial \theta} [\mathcal{Z} A_\theta] + \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial A_\varphi}{\partial \varphi} \quad (\text{D.13})$$

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2 \mathcal{Z}} \frac{\partial}{\partial \theta} \mathcal{Z} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{1}{\mathcal{Z}^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \quad (\text{D.14})$$

Referências Bibliográficas

- [1] K. V. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45** (1980) 494;
- [2] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **48** (1982) 1559;
- [3] R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 1395;
- [4] D. J. Thoules, "*Topological Quantum Numbers in Nonrelativistic Physics*", World Scientific (1998);
- [5] S. C. Zhang, Physics **1** (2008) 6;
- [6] E. Majorana, Nuovo Cimento **14** (1937) 171;
- [7] F. Wilczek, Nature Physics **5** (2009) 614 ;
- [8] S. R. Elliott, and M. Franz, Rev. Mod. Phys., **87** (2015) 137;
- [9] A. Kitaev, Phys. Usp. **44** (2001) 131;
- [10] B. A. Bernevig, Taylor L. Hughes; "*Topological Insulators and Topological Superconductors*", Princeton University Press (2013);
- [11] C. Nayak, et al., Rev. Mod. Phys. **80** (2008) 1083;
- [12] D. Litinski, and F. von Oppen, Phys. Rev. B **97** (2018) 205404;
- [13] L. S. Ricco et al, Scientific Reports **8** (2018) 2790;

- [14] N. Nagaosa, and Y. Tokura, *Nat. Nano.* **8** (2013) 899;
- [15] I.E. Dzyaloshinskii, *J. Phys. Chem. Solids* **4** (1958) 241;
- [16] T. Moriya, *Phys. Rev.* **120** (1960) 91;
- [17] A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, *Nat. Nanotechnol.* **8** (2013) 152;
- [18] N. S. Kiselev, et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **44** (2011) 392001;
- [19] R. Tomasello, E. Martinez, R. Zivieri, L. Torres, M. Carpentieri, and G. Finocchio, *Sci. Rep.* **4** (2014) 6784;
- [20] J. Zang, M. Mostovoy, J. H Han, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 136804;
- [21] J. Sampaio, V. Cros, S. Rohart, A. Thiaville, and A. Fert, *Nat. Nanotechnol.* **8** (2013) 839;
- [22] J. Iwasaki, M. Mochizuki, and N. Nagaosa, *Nat. Nanotechnol.* **8** (2013) 742;
- [23] J. Iwasaki, M. Mochizuki, and N. Nagaosa, *Nat. Commun.* **4** (2013) 1463;
- [24] J. Iwasaki, W Koshibae, and N. Nagaosa, *Nano Lett.* **14** (2014) 4432;
- [25] R. E. Troncoso, and A. S. Nuñez, *Phys. Rev. B* **89** (2014) 224403;
- [26] C. Schutte, J. Iwasaki, A. Rosch, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B* **90** (2014) 174434;
- [27] L. Kong, and J. Zang, *Phys. Rev. Lett.* **111** (2013) 067203;
- [28] A. A. Kovalev, *Phys. Rev. B* **89** (2014) 241101;
- [29] S.-Z. Lin, C. D. Batista, C. Reichhardt, and A. Saxena, *Phys. Rev. Lett.* **112** (2014) 187203;

- [30] F. Jonietz, et al., *Science* **330** (2010) 1648;
- [31] M. E. Knoester, J. Sinova, and R. A. Duine, *Phys. Rev. B* **89** (2014) 064425;
- [32] X. Z. Yu, et al., *Nat. Commun.* **3** (2012) 988;
- [33] S. Muhlbauer, et al., *Science* **323** (2009) 915;
- [34] W. Munzer, et al., *Phys. Rev. B* **81** (2010) 041203(R);
- [35] P. Milde, et al., *Science* **340** (2013) 1076;
- [36] M. Nagao, et al., *Nature Nanotechnol.* **8** (2013) 325;
- [37] S. Seki, X.Z. Yu, S. Ishiwata and Y. Tokura, *Science* **336** (2012) 198;
- [38] C. Pappas et al., *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 197202;
- [39] A. Tonomura, et al., *Nano Lett.* **12** (2012) 1673;
- [40] E. Moskvina, et al., *Phys. Rev. Lett.* **110** (2013) 077207;
- [41] X. Yu, et al., *Nature* **465** (2010) 901;
- [42] X. Z. Yu, et al., of the helimagnet FeGe. *Nat. Mater.* **10** (2011) 106;
- [43] S. Heinze, et al., *Nat. Phys.* **7** (2011) 713;
- [44] N. Romming, et al., *Science* **341** (2013) 636;
- [45] R. Streubel, P. Fischer, F. Kronast, V.P. Kravchuk, D.D. Sheka, Y. Gaididei, O.G. Schmidt, and D. Makarov, *J. Phys.* **D 49** (2016) 363001;
- [46] W. Gao, M. Karbasi, M. Hasanipanah, X. Zhang, and J. Guo, *Engineering with Computers* **34** (2018) 339;
- [47] W. Gao, S. M. Abrishamifar, G. E. Rajaei, R. Razavi, M. Najafi, *Chem. Phys. Lett.* **695** (2018) 44;

- [48] V.P. Kravchuk, D.D. Sheka, R. Streubel, D. Makarov, O.G. Schmidt, and Y. Gaididei, *Phys. Rev. B* **85** (2012) 144433;
- [49] V.L. Carvalho-Santos, W.A. Moura-Melo, and A.R. Pereira, *J. Appl. Phys.* **108** (2010) 094310;
- [50] V.L. Carvalho-Santos, R.G. Elias, J.M. Fonseca, and D. Altbir, *J. Appl. Phys.* **117** (2015) 17E518;
- [51] D. Goll, A. E. Berkowitz, and H. N. Bertram, *Phys. Rev. B* **70** (2004) 184432;
- [52] C. McKeever, F.Y. Ogrin and M.M. Aziz, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51** (2018) 305003;
- [53] V. L. Carvalho-Santos, F. A. Apolonio, N. M. Oliveira- Neto, *Phys. Lett. A* **377** (2013) 1308;
- [54] V. L. Carvalho-Santos, and R. Dandoloff, *Phys. Lett. A* **376** (2012) 3551;
- [55] V. L. Carvalho-Santos, and R. Dandoloff, *Braz. J. Phys.* **43** (2013) 130;
- [56] W. A. Freitas, W. A. Moura-Melo, and A. R. Pereira, *Phys. Lett. A* **336** (2005) 412;
- [57] F. M. H. Crompvoets, H. L. Bethlem, R. T. Jongma, and G. Meijer, *Nature (London)* **411** (2001) 174; S. Gupta, K. W. Murch, K. L. Moore, T. P. Purdy, and D. M. Stamper-Kurn, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 143201;
- [58] B. I. Dunlap, *Phys. Rev. B* **46**, 1933 (1992); J. Liu, H. Dai, J. H. Hafner, D. T. Colbert, R. E. Smalley, S. T. Tans, and C. Dekker, *Nature London* **385** (1997) 780;
- [59] S. Zhao, S. Zhang, M. Xia, E. Zhang, and X. Zuo, *Phys. Lett. A* **331** (2004) 238;

- [60] H. Watanabe, C. Manabe, T. Shigematsu, and M. Shimizu, *Appl. Phys. Lett.* **78** (2001) 2928;
- [61] J. M. Fonseca, V. L. Carvalho-Santos, A. R. Moura, W. A. Moura-Melo and A. R. Pereira *Eur. Phys. J. B* **89** (2016) 153;
- [62] A. Mary, D. M. Koller, A. Hobenau, J. R. Kren, A. Boubelier, and A. Dereux, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 245422;
- [63] A. Mary, A. Dereux, T. L. ferrell, *Phys. Rev. B* **72** (2005) 155426;
- [64] V. L. Carvalho-Santos, A. R. Moura, W. A. Moura-Melo, and A. R. Pereira, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 134450;
- [65] M. Kowsar, and H. Sabzyan, *Mol. Phys.* **44** (2017) 263;
- [66] S. Vojkovic, A.S. Nunez, D. Altbir, V.L. Carvalho-Santos, *J. Appl. Phys.* **120** 2016 033910;
- [67] Y. Gaididei, V.P. Kravchuk, and D.D. Sheka, *Phys. Rev. Lett.* **112** (2014) 257203;
- [68] S. Vojkovic, V.L. Carvalho-Santos, J.M. Fonseca, A.S. Nunez, *J. Appl. Phys.* **121** (2017) 113906;
- [69] V.P. Kravchuk, D.D. Sheka, and Y.B. Gaididei, *J. Magn. Mag. Mat.* **310** (2009) 116;
- [70] A. D. Sakharov, *JETP Lett.* **5** (1967) 24;
- [71] J. Bardeen ,L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108** (1957) 1175;
- [72] N. Read and Green Dmitry, *Phys. Rev. B* **61** (2000) 10267;
- [73] L. Fu, and C. L. Kane, *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 096407;

- [74] V. Mourik, et al, Science **336** (2012) 1003;
- [75] M. Tinkham; "*Introduction to Superconductivity*", 2 ed. - McGraw- Hill, (1996);
- [76] J. I. Kapusta, C. Gale, "*Finite-temperature Field Theory, Principles and Applications*", Cambridge University Press (1989);
- [77] A. W. Teixeira, V. L. Carvalho-Santos and J .M. Fonseca, Physics Letters A **384** (2020) 126182;
- [78] Alicea J., Rep. Prog. Phys **75** (2012) 076501;
- [79] M. Z. Hasan, C.L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82** (2010) 3045;
- [80] Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, Rev. Mod. Phys. **83** (2011) 1057;
- [81] E. C. Marino and L. H. C. M. Nunes, Nuc. Phy. B, **741** (2006) 404;
- [82] E. C. Marino, L.H.C.M. Nunes, arXiv:1109 .2151[cond -mat .str-el];
- [83] L. H. C. M. Nunes, A. W. Teixeira, E. C. Marino, Europhys. Lett. **110** (2015) 27008;
- [84] L. H. C. M. Nunes, A. W. Teixeira, E. C. Marino, Solid State Commun. **251** (2017) 5;
- [85] R. W .G. Wyckoff, "*Crystal Structures*", vol. 2, John Wiley and Sons, New York (1964);
- [86] T. Koretsune, R. Arita, Computer Physics Communications **220** (2017) 239;
- [87] P. B. Allen, "*Handbook of Superconductivity*", Academic Press, New York, (1999);
- [88] Fan Yang, et al., Physical Review B **86** (2012) 134504;

- [89] P. Arevalo-López, R.E. López-Romero, R. Escudero, arXiv:1512.09098[cond-mat .supr-con];
- [90] P. Landeros, and Á.S. Núñez, J. Appl. Phys. **108** (2010) 033917;
- [91] D. D. Sheka, V.P. Kravchuk, and Y. Gaididei, J. Phys. A: Math. Theor. **48** (2015) 125202;
- [92] J. Benoit and R. Dandoloff, Phys. Let. A **248** (1998) 439;
- [93] P. Landeros, J. Escrig, D. Altbir, D. Laroze, J. d'Albuquerque e Castro, and P. Vargas, Phys. Rev **B 71** (2005) 094435;
- [94] M. J. Donahue and D. G. Porter, "*National Institute of Standards and Technology Interagency Reports*", NISTIR No. 6376 (1999);
- [95] S J. Son, J. Reichel, B. He, M. Schuchman, and S. B. Lee, J. Am. Chem. Soc. **127** (2005) 7316;
- [96] C. S. B. Dias, T. D. M. Hanchuk, H. Wender, W. T. Shigeyosi, J. Kobarg, A. L. Rossi, M. N. Tanaka, M. B. Cardoso, and F. Garcia, Sci. Rep. **7** (2017) 14843;
- [97] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys., **66** (1994) 763;
- [98] V. J. Emery, Phys. Rev. Lett., **58** (1987) 2794;
- [99] J. K. Jaina, and P. W. Anderson PNAS **23** (2009) 9131;
- [100] A. W. Teixeira, et al. em andamento;
- [101] A. A. Thiele, Phys. Rev. Lett. **30** (1973) 230;
- [102] W. F. Brown Jr., Phys. Rev. **130** (1963) 1677;

- [103] R. A. Duine, A. S. Núñez, A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 056605;
- [104] K. Everschor, et al., Phys. Rev. B **86** (2012) 054432;
- [105] Y.-H. Liu, Y.-Q. Li, Chin. Phys. B **24** (2015);
- [106] F. Buttner, et al., Nat. Phys. **11** (2015) 225;
- [107] C. Moutafis, S. Komineas, and J. A. C. Bland, Phys. Rev. B **79** (2009) 224429;
- [108] I. Makfudz, B. Kruger, O. Tchernyshyov, Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 217201;
- [109] J. C. Martinez and M. B. A. Jalil, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **424** (2017) 291;
- [110] J. Hagemester et al., Nature Communications **8455** (2015) 6;
- [111] T. Schulz et al., Nature Phys. **8** (2012) 301;
- [112] W. Koshibae and N. Nagaosa, Sci. Rep. **8** (2018) 6328;
- [113] A. W. Teixeira, et al.; em andamento;
- [114] A. W. Teixeira, et al., Journal of Magnetism and Magnetic Materials **478** (2019) 253;
- [115] H. B. Callen, "*Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*", John Wiley and Sons, New York (1985);
- [116] R. P. Feynman, Physical Review **91** (1953) 1291.