



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

EFFECTO TÚNEL CUÁNTICO DE LA VORTICIDAD EN ANILLOS MAGNÉTICOS

TESIS PARA OPTAR AL TÍTULO DE GRADO DE MAGÍSTER EN CIENCIAS,
MENCION FÍSICA

MARÍA JOSÉ SANTANDER ALARCÓN

PROFESOR GUÍA:
ÁLVARO SEBASTIÁN NÚÑEZ VÁSQUEZ

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
FELIPE BARRA DE LA GUARDA
SEBASTIÁN ANDRES REYES SWETT
JAIME RÖSSLER BONZI

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por CONICYT, FONDECYT 1110271, "Proyecto Anillo de Ciencia y Tecnología" ACT 1117, por "Financiamiento Basal para Centros Científicos y Tecnológicos de Excelencia" CEDENNA FB0807 y Núcleo Milenio Magnetismo Básico y Aplicado

SANTIAGO DE CHILE

2013

Resumen

En este trabajo se presentará una discusión teórica de ciertos procesos mecánico cuánticos que influyen en la dinámica colectiva de momentos magnéticos localizados. En el problema en particular que estudiamos estos momentos están distribuidos en el perímetro de un anillo. De este modo el sistema exhibe la libertad de manifestar dos posibles vorticidades. Por lo tanto focalizaremos nuestros esfuerzos en determinar la amplitud de reversión mediante efecto túnel de la vorticidad de este anillo. Presentaremos un estudio analítico que nos proporciona una comprensión acerca de dichos procesos de reversión. Este estudio está basado en la aproximación semiclásica para las integrales de camino que determinan estos procesos. El método usado es conocido como la aproximación del gas instantones.

Comenzamos la discusión estudiando la reversión de un momento magnético aislado e ilustramos el fenómeno de congelamiento del efecto túnel, que consiste en la cancelación de la amplitud de efecto túnel para ciertos valores de un campo magnético externo. A continuación nos enfocamos en la dinámica de un arreglo de espines en un anillo con acoplamiento ferromagnético. Este tipo de intercambio energético nos provee de un efecto de reversión caracterizado por un comportamiento coherente de todos los espines rotando colectivamente. De este modo es posible caracterizar la dinámica global mediante un momento magnético efectivo dependiente del número de sitios considerados en nuestro anillo. En conclusión, mostramos que la amplitud de probabilidad de reversión de la vorticidad como función del campo externo manifiesta oscilaciones que corresponden al congelamiento del efecto túnel. El formalismo presentado nos permite identificar el origen de dicho congelamiento en la interferencia destructiva de dos caminos de reversión de la vorticidad, uno a través del interior y otro por el exterior del anillo.

*Ahora
que ya nada me separa
del sabor que experimenta la hoja
cuando le cae encima la mirada del hombre;
Me despido de la virtud como de una vieja amiga
y existo entre los malhechores,
entre los profanadores de tumbas;
Y soy un dios de carne y hueso
para los espantapájaros.*

Stella Díaz Varín

Agradecimientos

Cuando decidí comenzar este viaje hacia una nueva percepción de la naturaleza y con ello acerca de la vida. No lograba divisar cual sería el camino que me llevaría al final, ni siquiera alcanzada a imaginar cual sería el final. Solo tenía ganas de emprender el viaje. Como todos los viajes espontáneos tienen sus periodos de confusión. De no saber si es mejor el norte o quizás el sur... lo importante es mantenerse, lo importante es seguir. Es en este seguir que me encontré con él profesor Álvaro. Con el tiempo él consiguió potenciar mis virtudes y comprender mis debilidades. Me hizo llegar más allá de las capacidades que hasta ese momento había desarrollado como exploradora... logré expandir mis límites!!.

Ahora puedo comprender que no existe final solo comienzo, y este comienzo no podría haberlo logrado sin su ayuda. Gracias por ser mi maestro. Gracias por ser mi amigo.

Gracias a mi familia por ser tan importante en este andar. Por entregarme libertad desde siempre, libertad que solo se puede obtener a través de la confianza. . . gracias por confiar en mi.

A mis amigos y compañeros muchas gracias!!

Tabla de contenido

Índice de figuras	ix
1. Introducción	1
1.1. Efecto túnel	1
1.2. Moléculas Magnéticas	4
2. Spin Aislado	6
2.1. Spin 1	8
2.2. Spin $\frac{3}{2}$	8
2.3. Spin 2	11
2.4. Spin $\frac{5}{2}$	13
2.5. Conclusión	14
3. Analisis Semiclásico	16
3.1. Soluciones clásicas	16
3.2. Instantones	17
3.2.1. Integrales de camino	18
3.3. Determinación del gap	23
4. Anillo de Spin	27
4.1. Introducción	27
4.2. Hamiltoniano del anillo de spin	28
4.3. Gap asociado a la quiralidad	29
4.4. Spin efectivo asociado a la quiralidad	31
4.5. Conclusión	33
5. Conclusión	34
6. Bibliografía	37
Apéndices	38
A. Integrales de camino	38
B. Integrales de camino de spin	40
C. Fase de Berry	42

Índice de figuras

1.1.	<i>En la figura se puede observar una partícula atravesando una barrera potencial. Figura tomada del texto [3].</i>	2
1.2.	<i>Potencial $V(x) = \frac{V_0}{a^4}(x^2 - a^2)^2$. Manifiesta dos mínimos degenerados para $x = -a$ (izquierda) y $x = a$ (derecha).</i>	3
1.3.	<i>La representación química completa del $Mn_{12}Ac$ es $M_{12}O_{12} (CH_3COO)_{16} (H_2O)$. Esta molécula tiene 4 iones de Mn^{4+} ($S = 3/2$) y 8 iones de Mn^{3+} de spin $S = 2$ el acople entre los distintos iones da origen a un spin total de $S = 10$. Los ligandos de acetato están en el exterior de la molécula y pueden ser potencialmente cambiados para ajustar las propiedades de la misma.</i>	5
1.4.	<i>La representación química completa del Fe_8 es $(tacn)_6 Fe_8O_2 (OH)_{12} (H_2O)$ tiene 8 iones de Fe^{3+} con spin $S = 5/2$ dando lugar a un spin total $S = 10$. Los ligandos $tacnC_6H_{12} (NH)_3$ están situados en el exterior de la molécula</i>	5
2.1.	<i>En este gráfico mostramos la energía en un código de colores donde los tonos oscuros corresponden a los mínimos del potencial. En el gráfico de la izquierda mostramos el caso sin campo magnético mientras que en el de la derecha mostramos el efecto que tiene un campo magnético en el eje z. Hemos usado coordenadas esféricas con θ indicando el ángulo que forma la magnetización con el eje z.</i>	7
2.2.	<i>Este gráfico muestra las autoenergías para un spin de $S = 1$. La intersección entre los dos valores mas bajos da lugar a un congelamiento del efecto túnel.</i>	9
2.3.	<i>En este gráfico se muestra, con las mismas unidades que el gráfico anterior, el comportamiento de la brecha energética en función del campo magnético. Notemos como hay un punto en el cual el gap se anula dando origen al fenómeno de congelamiento del efecto túnel, que será discutido en detalle en el capítulo siguiente</i>	9
2.4.	<i>Este gráfico muestra las autoenergías para un spin de $S = 3/2$. La intersección entre los dos valores mas bajos da lugar a un congelamiento del efecto túnel.</i>	10
2.5.	<i>En este gráfico se muestra el comportamiento de la brecha energética en función del campo magnético. Se observan dos puntos en los cuales el gap se anula, uno de los cuales se encuentra a campo cero.</i>	11
2.6.	<i>Este gráfico muestra las autoenergías para un spin $S = 2$. La intersección entre los dos valores mas bajos da lugar a un congelamiento del efecto túnel.</i>	12

2.7.	<i>En este gráfico se muestra, utilizando las mismas unidades que en el gráfico anterior, el comportamiento de la brecha energética en función del campo magnético. Notemos como hay dos puntos en los cuales el gap se anula dando origen al fenómeno de congelamiento del efecto túnel.</i>	13
2.8.	<i>En este gráfico se muestra el comportamiento de la brecha energética en función del campo magnético. Notemos como hay tres puntos en los cuales el gap se anula dando origen al fenómeno de congelamiento del efecto túnel.</i>	14
3.1.	<i>Coordenadas esféricas asociadas al Hamiltoniano de spin.</i>	16
3.2.	<i>Las posibles configuraciones para $\phi = 0$ y $\phi = \pi$. Cuando el campo es nulo, $h = 0$, encontramos que $\theta = \pi/2$ es decir el spin esta en el plano xy luego cuando el campo no es nulo $h \neq 0$ el spin comienza a adquirir componente perpendicular al plano adquiriendo una inclinación que dependerá del campo aplicado.</i>	17
3.3.	<i>Orientación de las coordenadas utilizadas para definir los estados coherentes de spin. Estos son definidos como los estados de mínima incerteza con valor de expectación a lo largo de la dirección indicada. (figura tomada de[5]) . . .</i>	19
3.4.	<i>El término geométrico corresponde a la fase de Berry que corresponde al área de ángulo sólido que genera el spin originado por el efecto túnel entre los dos estados que minimizan \mathcal{H} definidos anteriormente.</i>	20
3.5.	<i>Las soluciones con forma de instantones pueden ocurrir en distintos instantes de tiempo. Cada una de las soluciones es un camino válido de fase estacionaria. Es necesario sumar sobre todas ellas.</i>	21
3.6.	<i>Además debemos considerar la suma de caminos consistentes en un instanton seguido de un anti-instanton, seguido de un instanton, etc. Todos ocurriendo en distintos tiempos $\tau_1 < \tau_2 < \tau_3$, respectivamente.</i>	22
3.7.	<i>En la técnica de la fase estacionaria el camino de integración es deformado para que atravesase por puntos donde la fase sea estacionaria. En el contexto de integrales de camino esta deformación se hace en cada instante de tiempo</i>	24
3.8.	<i>En la figura mostramos el gap en función del campo magnético según lo estimado por la aproximación de instantones. La similitud con los resultados exactos obtenidos en el capítulo anterior es evidente. El gap está expresado en unidades arbitrarias debido a que hay un factor de escala indeterminado.</i>	26
4.1.	<i>Comportamiento del gap como función de h para $j = 0,2$. En este gráfico hemos considerado $S = 1$ y $\mathcal{N} = 10$. Para este cálculo hemos considerado un spin efectivo con Hamiltoniano en la ecuación 4.12.</i>	31
4.2.	<i>Dos caminos de reversión que interfieren destructivamente para ciertos valores del campo magnético.</i>	32
4.3.	<i>Comportamiento analítico del gap en función del campo magnético para $\mathcal{N} = 20$ y $\mathcal{E}/\mathcal{D} = 0,3$. Observamos oscilaciones que reflejan la interferencia entre los distintos modos de reversión de la vorticidad. Dichas interferencias son consecuencia del comportamiento colectivo.</i>	32
5.1.	<i>En este gráfico se muestra el comportamiento de la brecha energética en función del campo magnético. Se observan dos puntos en los cuales el gap se anula uno de los cuales se encuentra a campo cero.</i>	35

5.2. *Dos caminos de reversión que interfieren destructivamente para ciertos valores del campo magnético.* 36

Capítulo 1

Introducción

1.1. Efecto túnel

Desde que fue propuesto por Gamow en 1928 como el mecanismo detrás de la misteriosa radiación α , el efecto túnel[3] ha permitido diversas aplicaciones en una amplia gama de sistemas. Su carácter es esencialmente cuántico y por ello, cada vez que es invocado, se plantea como un desafío a la intuición. En términos simples, el efecto túnel consiste en la exploración, por parte de partículas, de zonas energéticamente prohibidas desde un punto de vista clásico. Para poner el efecto túnel en el contexto más usual, es conveniente considerar el siguiente ejemplo. Consideremos una partícula de masa m que atraviesa un potencial de la forma indicada en la figura. El potencial es descrito por

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| > a \\ V_o & |x| < a \end{cases} \quad (1.1)$$

La energía asociada a tal sistema está dada por:

$$E = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{x}) \quad (1.2)$$

Si efectivamente $V(\mathbf{x}) > E$ encontramos que $\mathbf{p}^2 < 0$ lo cual nos indica que \mathbf{p} es imaginario. Este argumento es físicamente inaceptable. A partir de esto surge la pregunta de por que el efecto túnel es exclusivamente un fenómeno cuántico sin una contraparte clásica observable. La respuesta está dada por el principio de incerteza, debido a que asumimos conocer simultáneamente en todo instante de tiempo la energía cinética asociada al vector \mathbf{p} y la energía potencial asociada al vector \mathbf{x} es que nuestro razonamiento es erróneo. Por lo tanto debemos considerar que el principio de incerteza que experimenta la energía cinética en términos del vector \mathbf{p} y de su variable conjugadas \mathbf{x} es:

$$\Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{p} \approx \frac{\hbar}{2} \quad (1.3)$$

Por otro lado, la propagación de la partícula está descrita por un movimiento ondulatorio con número de onda

$$\kappa = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

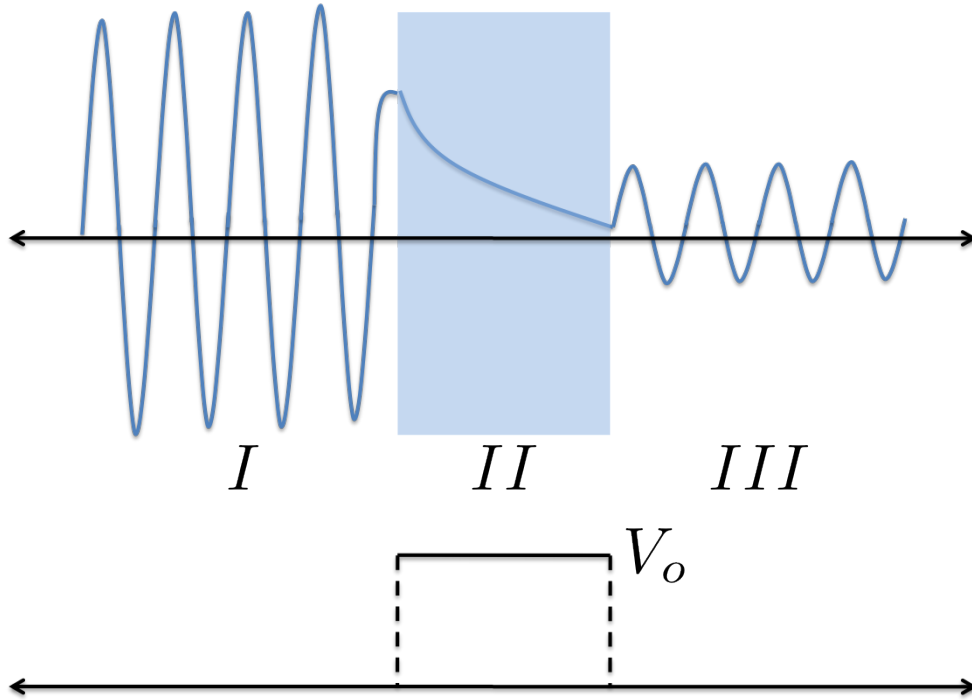


Figura 1.1: En la figura se puede observar una partícula atravesando una barrera potencial. Figura tomada del texto [3].

en las zonas I y III y por ondas evanescentes que decaen como

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E)$$

en la zona II . Es un resultado común que la probabilidad de transición, en el caso $qa \gg a$ es:

$$T \approx \left(\frac{4\kappa q}{\kappa^2 + q^2} \right)^2 e^{-4qa} \quad (1.4)$$

Notamos el comportamiento exponencial tanto en el ancho de la barrera como en el tamaño de esta[3]. Este comportamiento exponencial es característico del fenómeno de túnel que a su vez exhibe la gran sensibilidad de las aplicaciones desarrolladas en base a este.

Entre estas aplicaciones resaltamos el microscopio de efecto túnel. Tal microscopio permite la resolución a nivel atómico de la topografía de superficies cristalinas. Por otro lado el efecto túnel de protones presentes en el átomo de hidrogeno entre distintas configuraciones en una molécula de ADN corresponde a un mecanismo importante de mutación. Otras aplicaciones importantes del efecto túnel incluyen las junturas túnel y el diodo túnel, ambos referidos a el efecto túnel de electrones en semiconductores.

Otro fenómeno asociado al efecto túnel de una partícula es el comportamiento que presenta en un potencial doble como se puede observar en la figura.

Los estados cuánticos asociados al mínimo izquierdo y al derecho de este potencial son $|I\rangle$

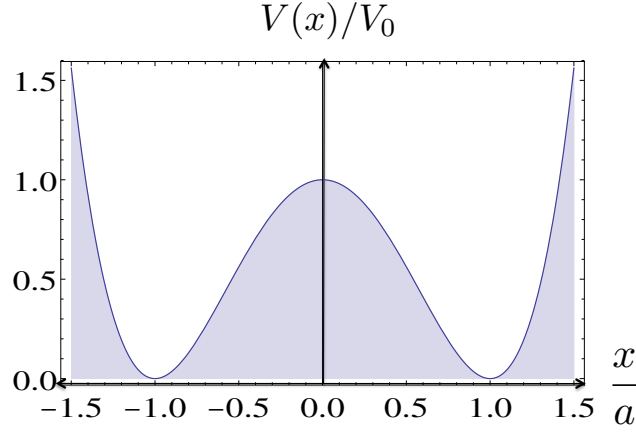


Figura 1.2: Potencial $V(x) = \frac{V_0}{a^4}(x^2 - a^2)^2$. Manifiesta dos mínimos degenerados para $x = -a$ (izquierda) y $x = a$ (derecha).

y $|D\rangle$ respectivamente. Los autoestados cuánticos están descritos por:

$$\begin{aligned} |B\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|I\rangle + |D\rangle) \\ |X\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|I\rangle - |D\rangle). \end{aligned} \quad (1.5)$$

Las energías de estos estados están dadas por:

$$\begin{aligned} E_G &= E_0 - \frac{\Delta}{2} \\ E_X &= E_0 + \frac{\Delta}{2} \end{aligned} \quad (1.6)$$

respectivamente.

Si preparamos el sistema para que la partícula se encuentre inicialmente en la derecha, es decir:

$$|\phi(t=0)\rangle = |D\rangle, \quad (1.7)$$

de las ecuaciones anteriores se puede obtener

$$|\phi(t=0)\rangle = \sqrt{2} (|B\rangle - |X\rangle). \quad (1.8)$$

Al evolucionar el sistema en el tiempo lo hará en proporción a la energía asociada a los estados descritos anteriormente, estos son el estado basal y el primer estado excitado. Dado que el estado asociado a un mínimo no es un autoestado la partícula comenzará a oscilar de izquierda a derecha, es decir:

$$|\phi(t)\rangle = C_0 \left(e^{i(E_0 - \frac{\Delta}{2})t} |B\rangle - e^{i(E_0 + \frac{\Delta}{2})t} |X\rangle \right). \quad (1.9)$$

Podemos escoger el cero de energía arbitrariamente. Haciendo $E_0 = 0$ y usando la ecuación (1.5) obtenemos:

$$|\phi(t)\rangle = C_2 \left(\cos\left(\frac{\Delta}{2}t\right) |D\rangle + i \sin\left(\frac{\Delta}{2}t\right) |I\rangle \right), \quad (1.10)$$

donde C_2 es una constante aritmética. Esta última ecuación nos muestra que el periodo de oscilación de la partícula es inversamente proporcional a la brecha de energía que separa los dos autoestados cuánticos exhibidos anteriormente, es decir

$$T \propto \frac{2}{\Delta}$$

Este resultado es particularmente interesante puesto que nos entrega una medida de la amplitud de probabilidad del efecto túnel, que está íntimamente relacionada con la brecha de energía entre los dos autoestados descritos anteriormente.

1.2. Moléculas Magnéticas

Las moléculas magnéticas [2] [5] han sido sintetizadas desde los años '80, aunque sus propiedades magnéticas solo han sido estudiadas desde los '90. La forma esencial que tienen estas moléculas es un sistema de momentos magnéticos originados en iones de metales de transición unidos entre sí por ligandos variados (O^{2-} , OH^- , OCH_3^- , F^- , Cl^- , etc.). Estos ligandos permiten un acople entre los momentos magnéticos de los iones metálicos (mediante un proceso de superintercambio que entrega un acople de Heisenberg $J \sim 0,1 \cdots 10 \text{ meV}$) y al mismo tiempo encapsulan al sistema de momentos magnéticos protegiéndolo de interacciones con sistemas vecinos. Los imanes moleculares más destacados son el $Mn_{12}Ac$ y el Fe_8 . Estas moléculas son complejas y presentan distintos momentos magnéticos dependiendo del acople que estos tengan. Es importante destacar que las moléculas mencionadas tienen un carácter ferrimagnético. Esto quiere decir que los acoples entre los distintos momentos magnéticos no son homogéneos e incluso pueden ser antiferromagnéticos. El momento efectivo neto se origina en la descompensación entre estos acoples.

La importancia de estos imanes moleculares radica en el hecho de que cada molécula presenta un comportamiento colectivo en sus grados de libertad magnéticos. De este modo cada molécula se comporta como un pequeño imán. El momento magnético total, asociado a la molécula varía y depende del signo de la constante de intercambio entre momentos. La creación de cristales de estas moléculas, en los cuales los grados de libertad magnéticos permanecen, bajo una primera aproximación, aislados entre sí. Esta consideración nos permite una medición macroscópica de las propiedades magnéticas de cada molécula aislada. La capacidad de resolver experimentalmente propiedades magnéticas de una molécula aislada permite explorar efectos cuánticos en la dinámica de la magnetización. Entre los efectos cuánticos que exploraremos está el efecto túnel de la magnetización o de spin [8]. El efecto túnel de spin consiste en la transición de los estados magnéticos de una molécula, a través de estados clásicamente prohibidos. Es en este sentido análogo al efecto túnel de una partícula. Este efecto ha sido estudiado en diversos trabajos teóricos y ha sido reportado experimentalmente por muchos grupos de investigación.

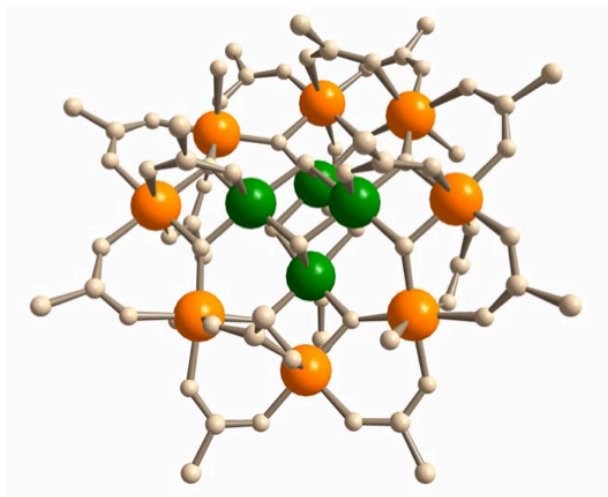


Figura 1.3: La representación química completa del Mn_{12}Ac es $\text{M}_{12}\text{O}_{12}(\text{CH}_3\text{COO})_{16}(\text{H}_2\text{O})$. Esta molécula tiene 4 iones de Mn^{4+} ($S = 3/2$) y 8 iones de Mn^{3+} de spin $S = 2$ el acople entre los distintos iones da origen a un spin total de $S = 10$. Los ligandos de acetato están en el exterior de la molécula y pueden ser potencialmente cambiados para ajustar las propiedades de la misma.

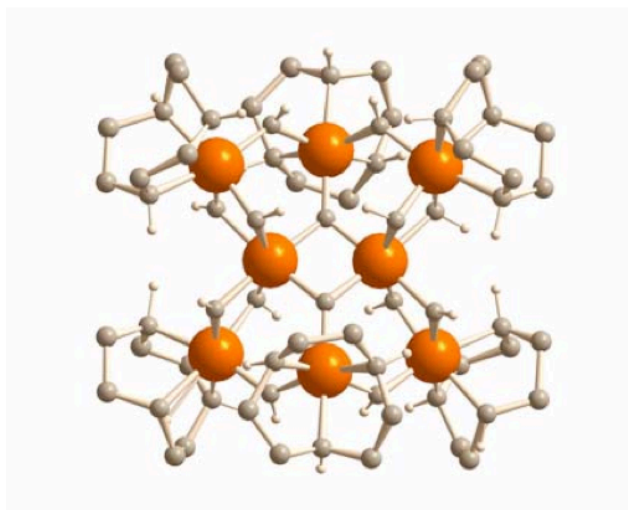


Figura 1.4: La representación química completa del Fe_8 es $(\text{tacn})_6\text{Fe}_8\text{O}_2(\text{OH})_{12}(\text{H}_2\text{O})$ tiene 8 iones de Fe^{3+} con spin $S = 5/2$ dando lugar a un spin total $S = 10$. Los ligandos $\text{tacnC}_6\text{H}_{12}(\text{NH})_3$ están situados en el exterior de la molécula

Capítulo 2

Spin Aislado

En esta sección estudiaremos un spin aislado. Esto nos permitirá comprender el comportamiento de este mediante la construcción de un hamiltoniano de spin. Este Hamiltoniano se obtiene a través de la reducción de los grados de libertad electrónicos. Es decir solo retenemos los grados de libertad de spin, mientras que los grados de libertad espaciales de los electrones se contraen dando lugar al acoplamiento spin-spin. Por tanto surgen las siguientes contribuciones:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{ani}} + \mathcal{H}_{\text{zee}}. \quad (2.1)$$

El primer término está vinculado a la anisotropía que da lugar a un quiebre en la simetría, optando el sistema por una configuración privilegiada para la energía. También se conoce como la energía asociada al campo cristalino, que está dado por:

$$\mathcal{H}_{\text{ani}} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{S} \quad (2.2)$$

el cual \mathbf{D} corresponde a un tensor simétrico.

$$\mathcal{H}_{\text{ani}} = -D_{xx} S_x^2 - D_{yy} S_y^2 - D_{zz} S_z^2 \quad (2.3)$$

Realizando un corrimiento de la energía mediante la constante:

$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{2} (D_{yy} + D_{zz}) (S + 1) S \\ &= \frac{1}{2} (D_{yy} + D_{zz}) (S_x^2 + S_y^2 + S_z^2) \end{aligned} \quad (2.4)$$

obtenemos:

$$\mathcal{H}_{\text{ani}} = - \left(D_{xx} - \frac{1}{2} (D_{yy} + D_{zz}) \right) S_x^2 + \frac{1}{2} (-D_{yy} + D_{zz}) S_y^2 + \frac{1}{2} (D_{yy} - D_{zz}) S_z^2$$

Donde finalmente podemos expresar el término anisotrópico

$$\mathcal{H}_{\text{ani}} = -\mathcal{D} S_x^2 + \mathcal{E} (S_z^2 - S_y^2) \quad (2.5)$$

$$\mathcal{D} = D_{zz} - \frac{1}{2} (D_{yy} + D_{zz}) \text{ y } \mathcal{E} = D_{yy} - D_{zz}$$

De esta manera se ajustarán los valores del tensor \mathbf{D} para obtener la anisotropía deseada.

El Hamiltoniano de Zeeman está dado por:

$$\mathcal{H}_z = -\mathbf{h} \cdot \mathbf{m} = -\mu_B \mathbf{h} \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} \quad (2.6)$$

donde μ_B corresponde al magneton de Bohr, \mathbf{h} es el campo magnético aplicado, y \mathbf{g} es el tensor que acopla el campo magnético al operador de spin. Podemos decir que el momento magnético \mathbf{m} está dado por:

$$\mathbf{m} = -\mu_B \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} \quad (2.7)$$

Físicamente este Hamiltoniano representa un spin sujeto a un potencial doble. Esto se puede ver por el primer término \mathcal{H}_{ani} presente en \mathcal{H} dado por su equivalencia a una partícula en un potencial simétrico. Esta analogía nos lleva a considerar:

- Si el spin se encuentra inicialmente en el estado inicial, representado por el mínimo izquierdo, este puede ir de derecha a izquierda con cierta frecuencia ω que depende de la forma del potencial.
- Las funciones propias del Hamiltoniano son deslocalizadas. Esta deslocalización corresponde a una superposición de las funciones de estado compatibles, con igual probabilidad de describir el sistema en el lado izquierdo o derecho.

El Hamiltoniano resultante se puede escribir como:

$$\mathcal{H} = -\mathcal{D}S_x^2 + \mathcal{E}(S_z^2 - S_y^2) + hS_z \quad (2.8)$$

A continuación revisaremos una galería de resultados usando $\mathcal{D} \gg \mathcal{E} > 0$. En ella se muestra

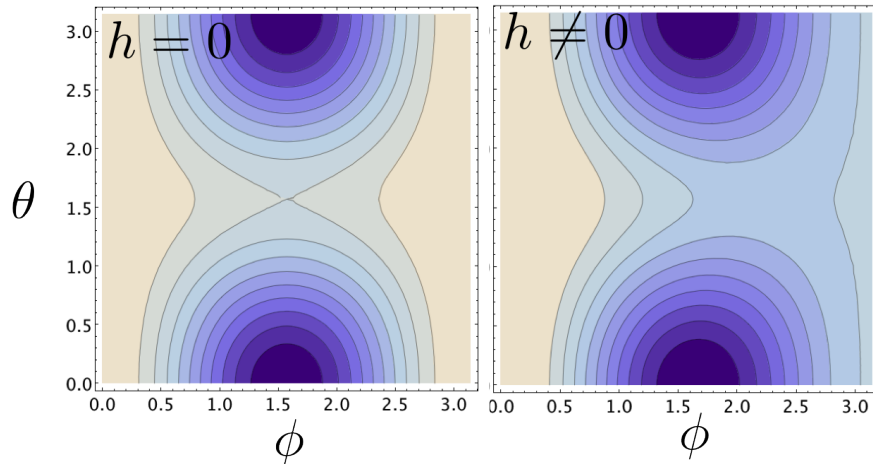


Figura 2.1: En este gráfico mostramos la energía en un código de colores donde los tonos oscuros corresponden a los mínimos del potencial. En el gráfico de la izquierda mostramos el caso sin campo magnético mientras que en el de la derecha mostramos el efecto que tiene un campo magnético en el eje z . Hemos usado coordenadas esféricas con θ indicando el ángulo que forma la magnetización con el eje z .

como el efecto del campo externo sobre la brecha (entre el estado basal y el primer estado

excitado) depende fuertemente del valor total del spin S . Para cada valor de S observaremos un número distinto de oscilaciones de la brecha. En particular para valores de S semientero vemos un cero en la brecha ubicado a campo cero.

2.1. Spin 1

Comenzaremos con spin $S = 1$ debido que para spin $S = 1/2$ no es posible obtener anisotropía puesto que $\mathbf{S}_x^2 = \mathbf{S}_y^2 = \mathbf{S}_z^2 = 1$. Representaremos los operadores de spin mediante las siguientes matrices

$$\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{S}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Utilizando el Hamiltoniano antes mencionado (2.8) obtenemos la forma matricial de la energía

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h - \frac{\mathcal{D}}{2} + \frac{\mathcal{E}}{2} & 0 & \frac{\mathcal{D}}{2} - \frac{\mathcal{E}}{2} \\ 0 & -\mathcal{D} - \mathcal{E} & 0 \\ \frac{\mathcal{D}}{2} - \frac{\mathcal{E}}{2} & 0 & -h - \frac{\mathcal{D}}{2} + \frac{\mathcal{E}}{2} \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

El cual al ser diagonalizado nos entrega las siguientes autoenergías

$$\mathbb{E}_1 = \mathcal{D} - \mathcal{E} \quad (2.11)$$

$$\mathbb{E}_2 = \frac{1}{2} \left(-\mathcal{D} - \sqrt{(\mathcal{D} - \mathcal{E})^2 + 4h^2} + \mathcal{E} \right) \quad (2.12)$$

$$\mathbb{E}_3 = \frac{1}{2} \left(-\mathcal{D} + \sqrt{(\mathcal{D} - \mathcal{E})^2 + 4h^2} + \mathcal{E} \right) \quad (2.13)$$

que presentan el comportamiento descrito en la figura (2.2). Para mayor comprensión esquematizamos la diferencia de los dos valores más bajos encontrados en la energía en la figura (2.3). Podemos observar el comportamiento oscilatorio de la brecha, el cero corresponde al congelamiento del efecto túnel, es decir el sistema adquiere una configuración y permanece en la elección.

2.2. Spin $\frac{3}{2}$

Al considerar el caso $S = 3/2$ tenemos que lidiar con matrices de dimensión $2S + 1 = 4$. Los operadores de spin se pueden encontrar explícitamente mediante el uso de operadores de subida y bajada. Las matrices resultantes son:

$$\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3} & 0 & -2i & 0 \\ 0 & 2i & 0 & -i\sqrt{3} \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$$

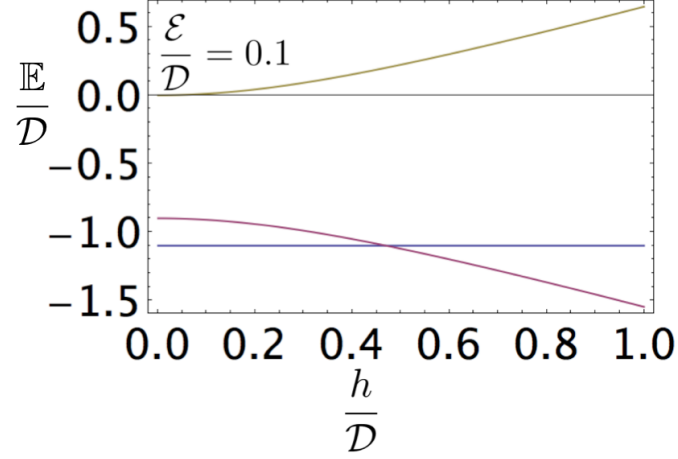


Figura 2.2: Este gráfico muestra las autoenergías para un spin de $S = 1$. La intersección entre los dos valores mas bajos da lugar a un congelamiento del efecto túnel.

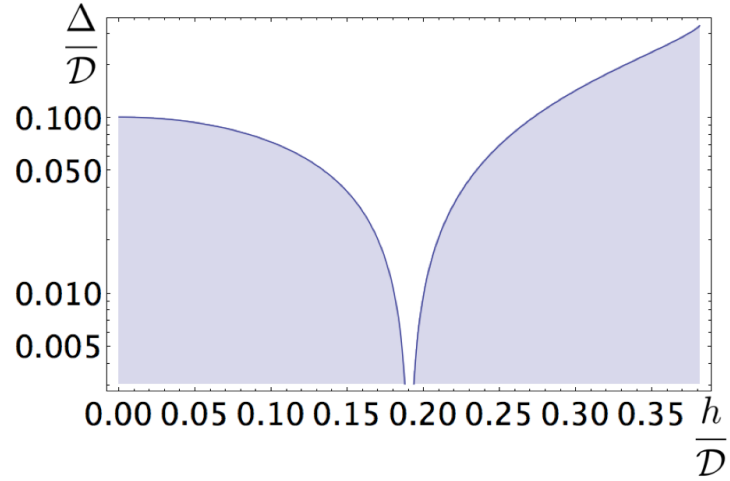


Figura 2.3: En este gráfico se muestra, con las mismas unidades que el gráfico anterior, el comportamiento de la brecha energética en función del campo magnético. Notemos como hay un punto en el cual el gap se anula dando origen al fenómeno de congelamiento del efecto túnel, que será discutido en detalle en el capítulo siguiente

$$\mathbf{S}_z = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Usando dichas matrices en la ecuación (2.8) se obtiene un Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -3h - \frac{3D}{4} + \frac{33E}{4} & 0 & \frac{\sqrt{3}D}{2} - \frac{\sqrt{3}E}{2} & 0 \\ 0 & -h - \frac{7D}{4} - \frac{3E}{4} & 0 & \frac{\sqrt{3}D}{2} - \frac{\sqrt{3}E}{2} \\ \frac{\sqrt{3}D}{2} - \frac{\sqrt{3}E}{2} & 0 & h - \frac{7D}{4} - \frac{3E}{4} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}D}{2} - \frac{\sqrt{3}E}{2} & 0 & 3h - \frac{3D}{4} + \frac{33E}{4} \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Este Hamiltoniano aún puede ser diagonalizado explícitamente, con los siguientes autovalores

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_1 &= \frac{1}{4} \left(-5\mathcal{D} - 4\sqrt{\mathcal{D}^2 + 3\mathcal{D}\mathcal{E} + 4h^2 - 2\mathcal{D}h - 18h\mathcal{E} + 21\mathcal{E}^2} - 4h + 15\mathcal{E} \right) \\ \mathbb{E}_2 &= \frac{1}{4} \left(-5\mathcal{D} + 4\sqrt{\mathcal{D}^2 + 3\mathcal{D}\mathcal{E} + 4h^2 - 2\mathcal{D}h - 18h\mathcal{E} + 21\mathcal{E}^2} - 4h + 15\mathcal{E} \right) \\ \mathbb{E}_3 &= \frac{1}{4} \left(-5\mathcal{D} - 4\sqrt{\mathcal{D}^2 + 3\mathcal{D}\mathcal{E} + 4h^2 + 2\mathcal{D}h + 18h\mathcal{E} + 21\mathcal{E}^2} + 4h + 15\mathcal{E} \right) \\ \mathbb{E}_4 &= \frac{1}{4} \left(-5\mathcal{D} + 4\sqrt{\mathcal{D}^2 + 3\mathcal{D}\mathcal{E} + 4h^2 + 2\mathcal{D}h + 18h\mathcal{E} + 21\mathcal{E}^2} + 4h + 15\mathcal{E} \right)\end{aligned}$$

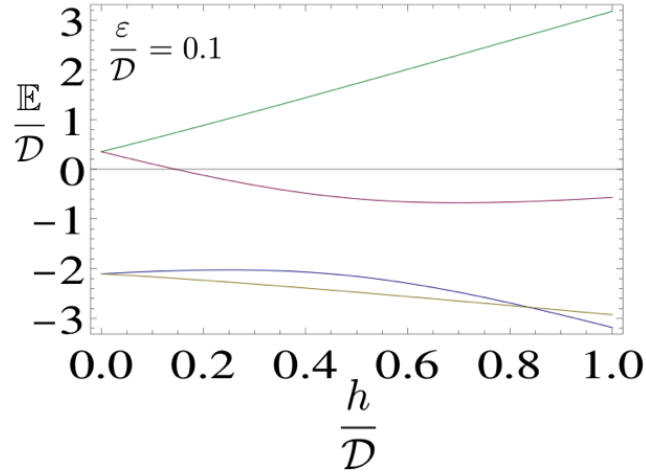


Figura 2.4: Este gráfico muestra las autoenergías para un spin de $S = 3/2$. La intersección entre los dos valores mas bajos da lugar a un congelamiento del efecto túnel.

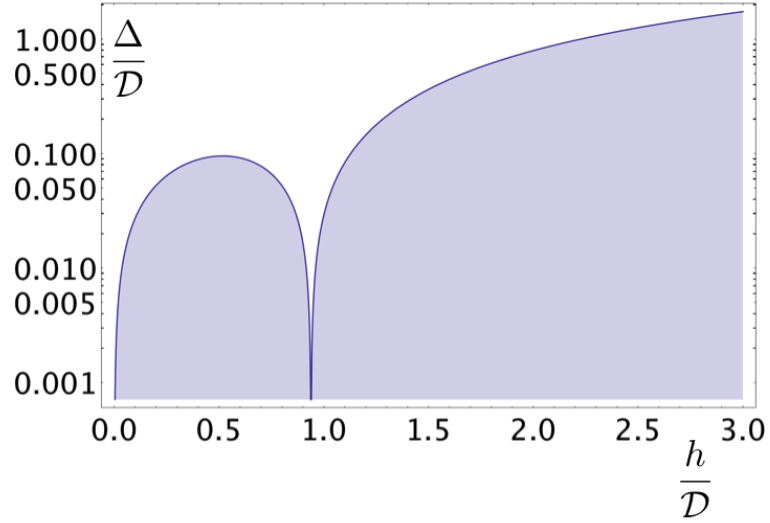


Figura 2.5: En este gráfico se muestra el comportamiento de la brecha energética en función del campo magnético. Se observan dos puntos en los cuales el gap se anula, uno de los cuales se encuentra a campo cero.

2.3. Spin 2

Analogamente a la sección anterior, por construcción directa de los operadores de subida y bajada obtenemos las matrices de spin para $S = 2$

$$\mathbf{S}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

$$\mathbf{S}_y = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

$$\mathbf{S}_z = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Usando la ecuación (2.8) obtenemos el Hamiltoniano de dimensión $2S + 1 = 5$

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -2h - \mathcal{D} + 3\mathcal{E} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}\mathcal{E} - \sqrt{\frac{3}{2}}\mathcal{D} & 0 & 0 \\ 0 & -h - \frac{5\mathcal{D}}{2} - \frac{3\mathcal{E}}{2} & 0 & \frac{3\mathcal{E}}{2} - \frac{3\mathcal{D}}{2} & 0 \\ \sqrt{\frac{3}{2}}\mathcal{E} - \sqrt{\frac{3}{2}}\mathcal{D} & 0 & -3\mathcal{D} - 3\mathcal{E} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}\mathcal{E} - \sqrt{\frac{3}{2}}\mathcal{D} \\ 0 & \frac{3\mathcal{E}}{2} - \frac{3\mathcal{D}}{2} & 0 & h - \frac{5\mathcal{D}}{2} - \frac{3\mathcal{E}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}\mathcal{E} - \sqrt{\frac{3}{2}}\mathcal{D} & 0 & 2h - \mathcal{D} + 3\mathcal{E} \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

En este caso no es posible obtener una expresión analítica, de todos modos podemos representar la solución numérica en el siguiente gráfico

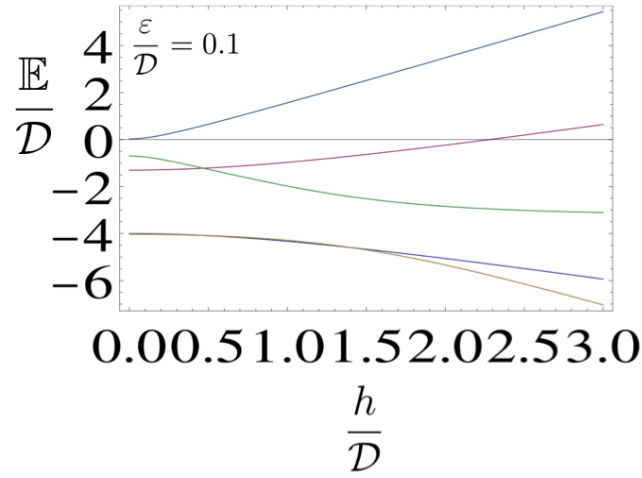


Figura 2.6: *Este gráfico muestra las autoenergías para un spin $S = 2$. La intersección entre los dos valores mas bajos da lugar a un congelamiento del efecto túnel.*

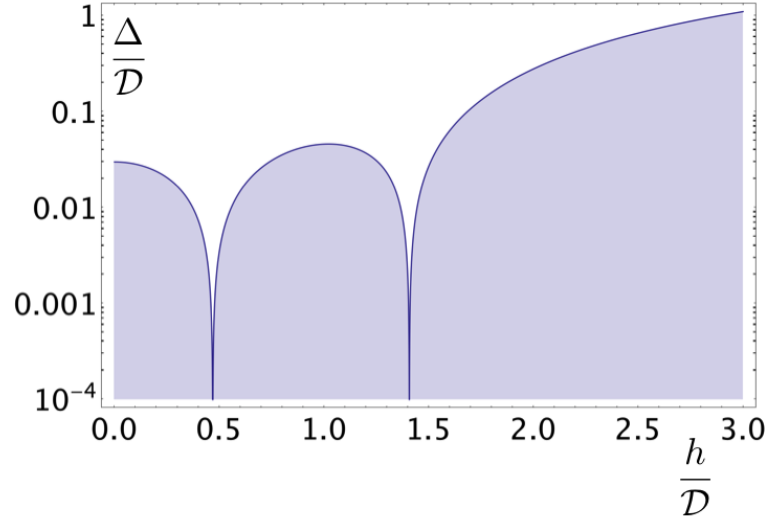


Figura 2.7: En este gráfico se muestra, utilizando las mismas unidades que en el gráfico anterior, el comportamiento de la brecha energética en función del campo magnético. Notemos como hay dos puntos en los cuales el gap se anula dando origen al fenómeno de congelamiento del efecto túnel.

2.4. Spin $\frac{5}{2}$

Como último ejemplo consideraremos el caso de spin $S = 5/2$ cuyas matrices de spin son:

$$\mathbf{S}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{5} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{5} & 0 & \sqrt{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{8} & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \sqrt{8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{8} & 0 & \sqrt{5} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{5} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

$$\mathbf{S}_y = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{5} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{5} & 0 & \sqrt{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{8} & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & 0 & \sqrt{8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{8} & 0 & \sqrt{5} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{5} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

$$\mathbf{S}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

En la figura 2.8 se muestra el comportamiento de la brecha energética en función del campo magnético.

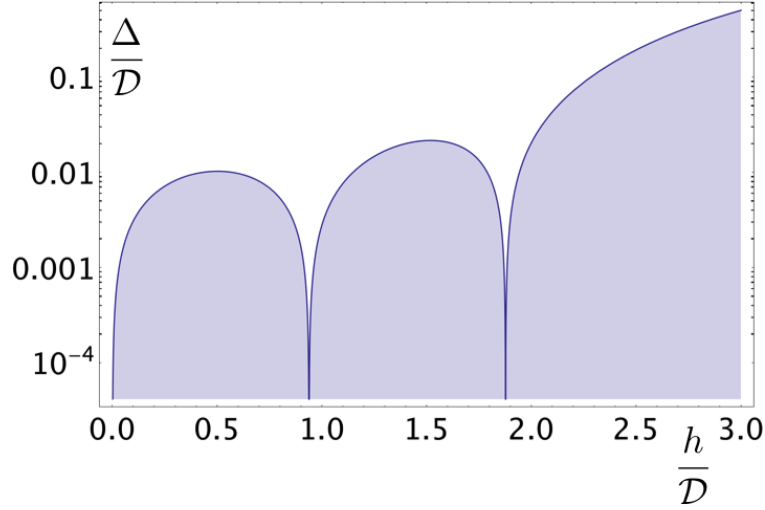


Figura 2.8: En este gráfico se muestra el comportamiento de la brecha energética en función del campo magnético. Notemos como hay tres puntos en los cuales el gap se anula dando origen al fenómeno de congelamiento del efecto túnel.

2.5. Conclusión

En conclusión podemos destacar dos comportamientos generales que se infieren de los ejemplos presentados. La primera es que la brecha energética entre el estado basal y el primer estado excitado presenta oscilaciones que la hacen pasar por cero para valores bien determinados del campo magnético. En dichos valores el estado basal muestra una degeneración que da origen al fenómeno conocido como el congelamiento del efecto túnel. El origen de este nombre será discutido en el capítulo siguiente. La segunda característica general del comportamiento de la brecha es su dependencia del spin involucrado. Para spin entero el número de ceros de la brecha es igual al spin total. El caso de spin semientero el número de oscilaciones es igual al menor entero mayor que el spin y tienen un cero directamente en el campo igual a cero. A pesar que estos comportamientos característicos serán explicados en el capítulo siguiente mediante la técnica de aproximación semiclásica y el uso de instantones daremos una breve explicación de este fenómeno desde el contexto de teoría de grupos. Debido a que es posible desentrañar a grandes rasgos lo que sucede en la degeneración a campo cero en el caso de spin semientero.

El Hamiltoniano a campo cero es de la forma

$$\mathcal{H}_{h=0} = -D S_x^2 + \mathcal{E} (S_z^2 - S_y^2). \quad (2.23)$$

Por tanto el grupo de simetrías del Hamiltoniano, es decir las transformaciones que dejan

nuestro sistema invariante, corresponde a:

$$\mathcal{D}_2 = \{\mathbb{R}(0), \mathbb{R}(\pi\hat{x}), \mathbb{R}(\pi\hat{y}), \mathbb{R}(\pi\hat{z})\}, \quad (2.24)$$

donde $\mathbb{R}(\phi\hat{n})$ corresponde al operador de rotación en un ángulo ϕ en torno al eje \hat{n} . Para spin entero se trata de un grupo abeliano puesto que son matrices diagonales que conmutan entre si. Esto nos entrega representaciones irreducibles unidimensionales por tanto tenemos una ausencia de degeneración a campo cero.

Sin embargo para spin semientero se da que:

$$\mathbb{R}(2\pi\hat{n}) \rightarrow e^{-2\pi i\hat{n}\cdot\vec{S}} = -\hat{\mathbf{1}} \quad (2.25)$$

Lo cual nos lleva a ampliar el grupo \mathcal{D}_2 al llamado grupo doble \mathcal{D}'_2 dicho grupo ya no es abeliano y posee una representación irreducible bidimensional de la forma:

$$D'_2 = \begin{cases} e^{2i\phi\hat{n}\cdot\vec{S}} \\ e^{2i(\phi+2\pi)\hat{n}\cdot\vec{S}} \end{cases} \quad (2.26)$$

En conclusión diremos que el grupo de simetría esta descrito para spin entero y semientero de la siguiente manera:

$$\mathcal{G}(\mathcal{H}(h=0)) = \begin{cases} D_2 : & e^{2i\pi\hat{n}\cdot\vec{S}} = \hat{\mathbf{1}} & S \text{ entero} \\ D'_2 : & e^{2i\pi\hat{n}\cdot\vec{S}} = -\hat{\mathbf{1}} & S \text{ semientero} \end{cases} \quad (2.27)$$

Esto tiene que ver con el teorema de Aharonov-Susskind de modo que la transformación que nos regresa a la identidad para spin semientero no es una rotación en 2π sino en 4π . Por tanto se puede probar que cualquier nivel de energía asociado a esta representación irreducible bidimensional nos entrega la dimensión de la degeneración.

Capítulo 3

Análisis Semiclásico

3.1. Soluciones clásicas

Para estudiar las soluciones clásicas consideraremos el Hamiltoniano referente a un spin aislado:

$$\mathcal{H} = -\mathcal{D}S_x^2 + \mathcal{E} (S_z^2 - S_y^2) - hS_z. \quad (3.1)$$

Representaremos el Hamiltoniano en coordenadas esféricas sustituyendo los operadores de spin por:

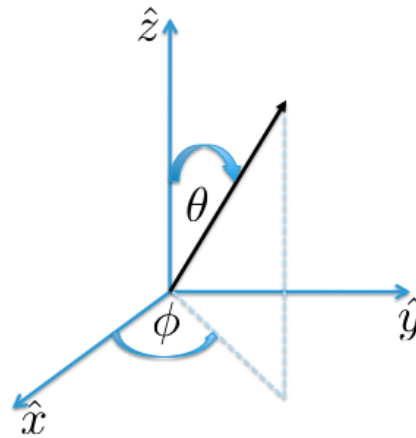


Figura 3.1: *Coordenadas esféricas asociadas al Hamiltoniano de spin.*

$$\begin{aligned} S_x &= S \sin \theta \cos \phi \\ S_y &= S \sin \theta \sin \phi \\ S_z &= S \cos \theta \end{aligned}$$

Observamos que la energía adquiere la siguiente forma:

$$\mathcal{H} = -\mathcal{D}S^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + \mathcal{E}S^2 (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta \sin^2 \phi) - hS \cos \theta \quad (3.2)$$

Minimizando \mathcal{H} respecto a ϕ y θ respectivamente

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} = (\mathcal{D} - \mathcal{E}) S^2 \sin^2 \theta \sin 2\phi = 0 \quad (3.3)$$

\Rightarrow

$$\phi_{\min} = 0, \pm\pi/2, \pi \quad (3.4)$$

Evaluando la segunda derivada encontramos que los valores de $\phi_{\min} = 0$ y $\phi_{\min} = \pm\pi$ son los que minimizan la energía en nuestro caso de interés, $\mathcal{D} > \mathcal{E} > 0$.

Evaluando con respecto a θ

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta} = -\mathcal{D}S^2 \sin 2\theta \cos^2 \phi - \mathcal{E}S^2 (\sin 2\theta + \sin 2\theta \sin^2 \phi) + hS \sin \theta \quad (3.5)$$

Simplificando y reemplazando por $\phi = \phi_{\min}$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta} = -2S^2 (\mathcal{D} + \mathcal{E}) \cos \theta + hS = 0. \quad (3.6)$$

Finalmente:

$$\cos \theta_o = \frac{h}{2S(\mathcal{D} + \mathcal{E})} \quad (3.7)$$

Juntando ambos resultados encontramos que las posibles configuraciones que minimizan la energía son $\{\theta = \theta_o; \phi = 0\}$ y $\{\theta = \theta_o; \phi = \pi\}$. Estas orientaciones se ilustran en la figura (3.2).

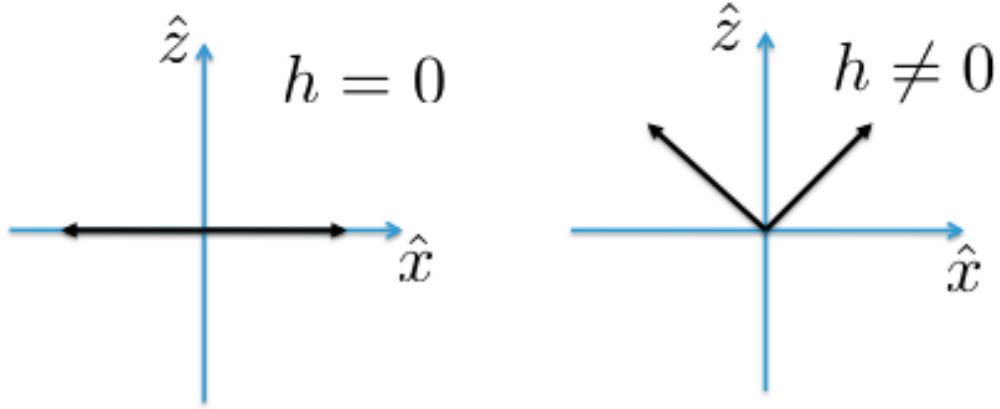


Figura 3.2: Las posibles configuraciones para $\phi = 0$ y $\phi = \pi$. Cuando el campo es nulo, $h = 0$, encontramos que $\theta = \pi/2$ es decir el spin esta en el plano xy luego cuando el campo no es nulo $h \neq 0$ el spin comienza a adquirir componente perpendicular al plano adquiriendo una inclinación que dependerá del campo aplicado.

3.2. Instantones

Para comenzar nuestro estudio analítico, consideraremos un spin aislado, clásicamente su estado más bajo de energía es degenerado como se puede observar en la figura (3.2). Por tanto

definiremos $|\uparrow\rangle = |\eta_1(\theta = \theta_o, \phi = 0)\rangle$ y $|\downarrow\rangle = |\eta_2(\theta = \theta_o, \phi = \pi)\rangle$ como las orientaciones de spin que minimizan $\mathcal{H}(\theta, \phi)$

El operador reflexión $\hat{\mathcal{R}}$ que transforma un estado en otro está dado por:

$$\hat{\mathcal{R}}|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad (3.8)$$

$$\hat{\mathcal{R}}|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \quad (3.9)$$

El valor de expectación de este operador, apoyado en la mecánica estadística

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{R}} \rangle &\propto \text{tr} \hat{\mathcal{R}} e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \langle \downarrow | e^{-\beta \mathcal{H}} \hat{\mathcal{R}} | \downarrow \rangle + \langle \uparrow | e^{-\beta \mathcal{H}} \hat{\mathcal{R}} | \uparrow \rangle \\ &= e^{-\beta(\mathcal{E}_o - \frac{\Delta}{2})} - e^{-\beta(\mathcal{E}_o + \frac{\Delta}{2})} \end{aligned}$$

donde hemos considerado el límite $\beta \rightarrow \infty$ es decir la temperatura $T \rightarrow 0$ para así poder conservar los dos estados de más baja energía en la traza. Considerando $\mathcal{E}_o = 0$, obtenemos

$$\langle \hat{\mathcal{R}} \rangle = \sinh\left(\frac{\beta \Delta}{2}\right) \quad (3.10)$$

Por otro lado podemos entregar una expresión explícita del valor de expectación de \mathcal{R} usando integrales de camino. Estas están descritas en el apéndice B.

3.2.1. Integrales de camino

Para comenzar nuestro análisis con integrales de camino debemos considerar todos los caminos que conectan el estado inicial con el estado final, estos están descritos por:

$$\langle \mathcal{R} \rangle = \langle \hat{\Omega}_N | e^{-\beta \mathcal{H}} | \hat{\Omega}_0 \rangle \quad (3.11)$$

Utilizando la resolución de la identidad en estados coherentes de spin[1]

$$\hat{\mathbf{1}} = \left(\frac{2S+1}{4\pi}\right) \int_n |\Omega_n\rangle \langle \Omega_n| d\Omega_n \quad (3.12)$$

podemos construir la representación de la integral de camino en la base de los estados coherentes de spin.

$$\langle \mathcal{R} \rangle = \left(\frac{2S+1}{4\pi}\right)^{N-1} \int d\Omega_1 \cdots \int d\Omega_{N-1} e^{-\mathcal{S}_E/\hbar} \quad (3.13)$$

En el límite de $N \rightarrow \infty$ esta expresión se puede entender como la integral sobre todos los caminos que conectan el estado inicial con el final. La acción Euclideana, que aparece en el exponente de la integral de camino, es[1]:

$$\mathcal{S}_E = \int_0^T d\tau \left(\frac{i\hbar}{2} (1 - \cos\theta) \dot{\phi} - \mathcal{H}(\hat{\Omega}) \right) \quad (3.14)$$

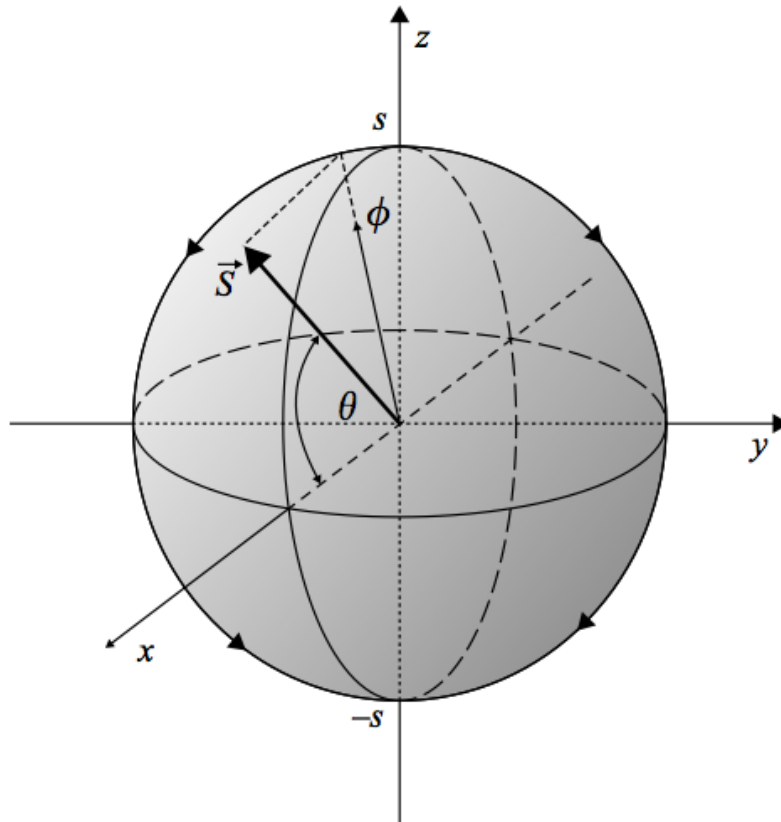


Figura 3.3: Orientación de las coordenadas utilizadas para definir los estados coherentes de spin. Estos son definidos como los estados de mínima incerteza con valor de expectación a lo largo de la dirección indicada. (figura tomada de[5])

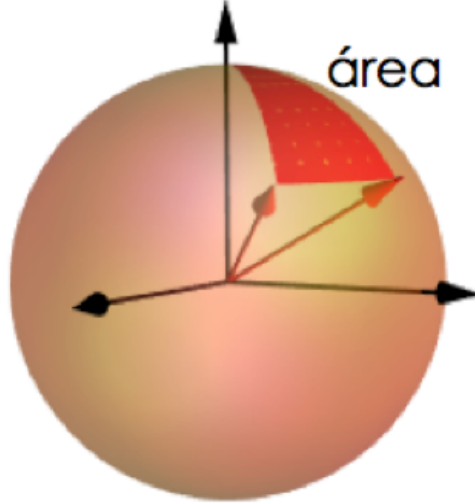


Figura 3.4: El término geométrico corresponde a la fase de Berry que corresponde al área de ángulo sólido que genera el spin originado por el efecto túnel entre los dos estados que minimizan \mathcal{H} definidos anteriormente.

Hemos usado la notación $T = \hbar\beta$ para enfatizar la analogía entre la integral de camino que obtuvimos y la resultante de la evolución temporal. La conexión entre ambas se puede establecer transformando el tiempo en una variable imaginaria. Es por esto que la acción resultante es denominada acción Euclídea.

La ecuación (3.14) contiene dos términos, el primero está dado por la fase que adquiere el spin en su trayectoria de reversión, esta fase se puede entender como el área de ángulo sólido que adquiere el spin sobre la esfera al moverse desde el estado inicial al final como se ilustra en la Fig. (3.4). Esta representado sobre la esfera puesto que los parámetros están representados por los estados coherentes.

En el límite en que $\hbar \rightarrow 0$, es decir en el régimen semiclásico la suma sobre caminos esta dominada por aquellos que hacen la acción estacionaria. Variando la acción encontramos que estos caminos deben satisfacer la ecuación de Landau-Lifshitz en tiempo imaginario:

$$i \frac{d\Omega}{d\tau} = \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\Omega} \times \Omega.$$

Esta ecuación debe ser complementada por las condiciones de borde $\Omega(0) = \hat{\eta}_1$ y $\Omega(T) = \hat{\eta}_2$. Una familia de soluciones características de esta ecuación es ilustrada en la figura (3.5). Básicamente esta familia corresponde a reversiones del spin abruptas que pueden ocurrir en distintos instantes de tiempo. Estos caminos elementales que minimizan la acción son conocidos como instantones[4].

Como nos interesa el límite de bajas temperaturas siempre se tendrá que la duración del instantón será mucho menor que $T = \beta\hbar$. Esto nos lleva a una proliferación de caminos

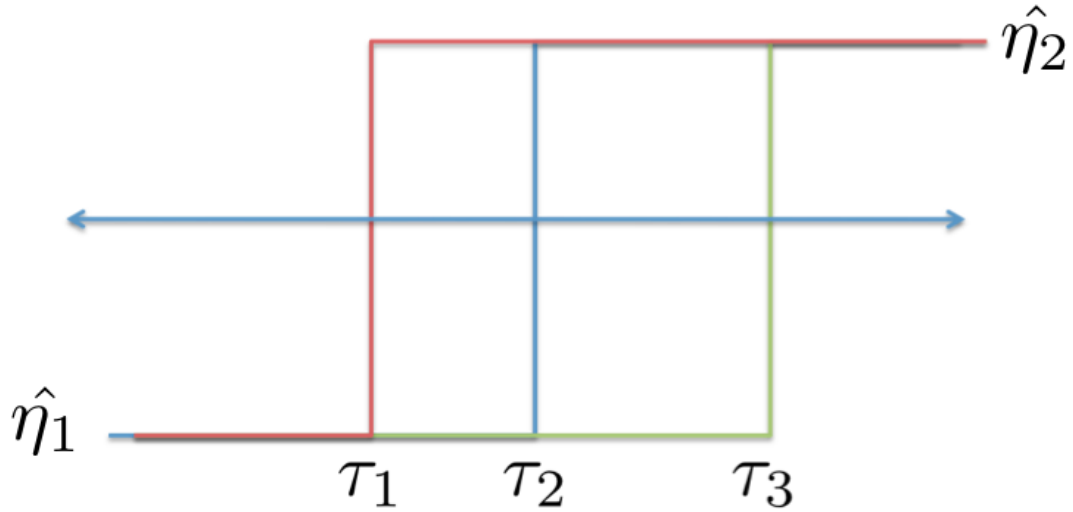


Figura 3.5: Las soluciones con forma de instantones pueden ocurrir en distintos instantes de tiempo. Cada una de las soluciones es un camino válido de fase estacionaria. Es necesario sumar sobre todas ellas.

alternativos que consisten en una secuencia alternada de instantones y anti instantones. Un camino característico de esta familia es ilustrado en la figura (3.6). Si bien es cierto que estos caminos no corresponden a una solución exacta de las ecuaciones de Landau-Lifshitz si corresponden a soluciones aproximadas mientras que el intervalo entre instantones y anti instantones sea mucho mayor que la duración de un proceso elemental. Esta aproximación es conocida como la aproximación del gas de instantones.

Tomando en cuenta la contribución de todos los caminos de reversión conformados por un gas de instantones llegamos a la siguiente expresión para el elemento de matriz bajo estudio:

$$\langle \hat{\eta}_2 | e^{-\beta \mathcal{H}} | \hat{\eta}_1 \rangle = \sum_{n=\text{impar}} \int_0^T e^{S_n} d\tau_n \cdots \int_0^{\tau_3} e^{S_2} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} e^{S_1} d\tau_1 \quad (3.15)$$

Donde el conjunto $\{S_1, S_2, \dots, S_n\}$ son las acciones correspondientes a los distintos instantones que forman parte del gas [4] y $\tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_n$ es la secuencia de tiempos a los que ocurren los instantones.

Debido a que estamos sumando sobre los caminos estacionarios encontramos que la acción debe ser la misma para cada instantón es decir

$$S_1 = S_2 = \dots = S_n = S_o \quad (3.16)$$

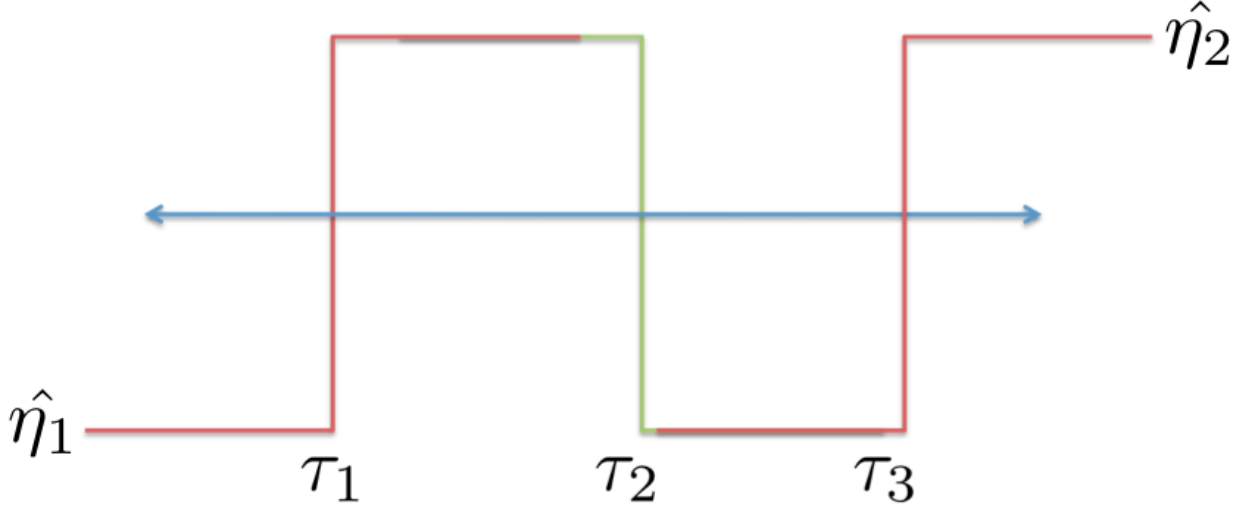


Figura 3.6: Además debemos considerar la suma de caminos consistentes en un instanton seguido de un anti-instanton, seguido de un instanton, etc. Todos ocurriendo en distintos tiempos $\tau_1 < \tau_2 < \tau_3$, respectivamente.

Por tanto encontramos que:

$$\langle \hat{\eta}_2 | e^{-\beta\mathcal{H}} | \hat{\eta}_1 \rangle = \sum_{n=\text{impar}} \int_0^T d\tau_n \cdots \int_0^{\tau_3} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 (Ke^{S_0})^n \quad (3.17)$$

donde hemos introducido la constante K . Esta constante corresponde a la contribución de caminos infinitesimalmente cercanos a los caminos de mínima acción. Para determinar el valor de K debemos estudiar las fluctuaciones cuánticas en torno a los caminos semiclásicos. Como veremos el valor específico de K no afectará cualitativamente los resultados que presentaremos. Es por este motivo que lo dejaremos como una constante indeterminada.

Usando:

$$\int_0^T d\tau_n \cdots \int_0^{\tau_3} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 = \frac{T^n}{n!} \quad (3.18)$$

obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \hat{\eta}_2 | e^{-\beta\mathcal{H}} | \hat{\eta}_1 \rangle &= \sum_{n=\text{impar}} \frac{T^n}{n} (Ke^{S_0})^n \\ &= \sinh(KTe^{S_0}) \end{aligned}$$

Es importante observar que al integrar el gas de instantones sobre los caminos estacionarios encontramos que la brecha energética se relaciona con la acción de un solo instantón[4].

$$\frac{\Delta}{2} = \hbar Ke^{S_0} \quad (3.19)$$

Este resultado nos permitirá evaluar la brecha por métodos directos usando solo un instantón[6].

3.3. Determinación del gap

Utilizando el Hamiltoniano (3.1) en las coordenadas descritas anteriormente obtenemos:

$$\mathcal{H} = -\mathcal{D}S^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + \mathcal{E}S^2 (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta \sin^2 \phi) - hS \cos \theta \quad (3.20)$$

El estado de mínima energía está dado por los valores encontrados para ϕ_{\min} y θ , los cuales entregan una energía:

$$\mathcal{H}_o = -\mathcal{D}S^2 - \frac{h^2}{4(\mathcal{D} + \mathcal{E})} \quad (3.21)$$

Un corrimiento constante en la energía nos permite fijar el valor basal igual a cero. Por lo tanto definiremos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= \mathcal{H} - \mathcal{H}_o \\ &= -\mathcal{D}S^2 (\sin^2 \theta \cos^2 \phi - 1) + \mathcal{E}S^2 (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta \sin^2 \phi) + hS \cos \theta + \frac{h^2}{4(\mathcal{D} + \mathcal{E})} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Reemplazando $\sin^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta$ encontramos la siguiente expresión para el Hamiltoniano

$$\mathcal{H}' = (\mathcal{D} + \mathcal{E}) S^2 \left(\cos \theta - \frac{h}{2S(\mathcal{D} + \mathcal{E})} \right)^2 + (\mathcal{D} - \mathcal{E}) S^2 \sin^2 \theta \sin^2 \phi \quad (3.23)$$

Inspirados en la ecuación (3.7) diremos que

$$\cos \theta_o = \frac{h}{2S(\mathcal{D} + \mathcal{E})} \quad (3.24)$$

Por lo tanto obtenemos

$$\mathcal{H}' = (\mathcal{D} + \mathcal{E}) S^2 (\cos \theta - \cos \theta_o)^2 + (\mathcal{D} - \mathcal{E}) S^2 \sin^2 \theta \sin^2 \phi \quad (3.25)$$

Las ecuaciones de movimiento semiclásicas (en tiempo imaginario) son conservativas, luego podemos decir que \mathcal{H}' , que es cero en los extremos del instantón (puntos de mínima energía), se anula a lo largo de todo el instantón.

$$(\mathcal{D} + \mathcal{E}) S^2 (\cos \theta - \cos \theta_o)^2 + (\mathcal{D} - \mathcal{E}) S^2 \sin^2 \theta \sin^2 \phi = 0 \quad (3.26)$$

Esta ecuación puede resolverse para $\cos \theta$ en función de ϕ :

$$\cos \theta = \frac{\cos \theta_o + i\sqrt{\lambda} \sin \phi \sqrt{1 - \cos^2 \theta_o + \lambda \sin^2 \phi}}{1 - \lambda \sin^2 \phi}, \quad (3.27)$$

donde

$$\lambda = \frac{\mathcal{D} - \mathcal{E}}{\mathcal{D} + \mathcal{E}}. \quad (3.28)$$

Notemos que esta solución entrega valores complejos para $\cos \theta$, en el limite

$$\begin{aligned} 0 &< 1 - \cos^2 \theta_o + \lambda \sin^2 \phi \\ \cos^2 \theta_o &< 1 + \lambda \sin^2 \phi \end{aligned}$$

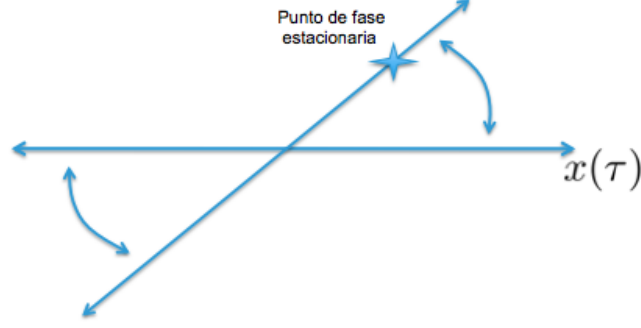


Figura 3.7: En la técnica de la fase estacionaria el camino de integración es deformado para que atravesase por puntos donde la fase sea estacionaria. En el contexto de integrales de camino esta deformación se hace en cada instante de tiempo

En la ecuación anterior hemos considerado $\mathcal{D} > \mathcal{E} > 0$. Enfatizamos esta característica debido a que es una peculiaridad de la técnica de la fase estacionaria. La solución encontrada es la que hace la acción estacionaria, sin importar si la solución corresponde a una solución física permitida. El resultado final es, sin embargo, el físicamente correcto. Para cada instante τ las variables de integración son promovidas a variables complejas, la rama física corresponde simplemente a una integral sobre el eje real. La técnica de la fase estacionaria explora un camino cerrado en el rango de integración que incluye el eje real y una línea que pasa por el punto de fase estacionaria.

Tenemos dos instantones uno con ϕ variando entre $0 \rightarrow \pi$ y entre $0 \rightarrow -\pi$. Como la energía es cero en cada instante la acción corresponde simplemente a la fase geométrica[6]:

$$S_{\pm} = iS \int_0^{\pm\pi} (1 - \cos \theta) d\phi \quad (3.29)$$

Tenemos que:

$$S_{\pm} = S_{\pm}^R + iS_{\pm}^I. \quad (3.30)$$

Podemos encontrar fácilmente:

$$S_+^R = S_-^R = S \int_0^{\pi} d\phi \frac{\sqrt{\lambda} \sin \phi \sqrt{1 - \cos^2 \theta_o + \lambda \sin^2 \phi}}{1 - \lambda \sin \phi} \quad (3.31)$$

$$S_+^I = -S_-^I = \frac{1}{2} S \int_{-\pi}^{\pi} \left(1 - \frac{\cos \theta_o}{1 - \lambda \sin^2 \phi} \right) d\phi \quad (3.32)$$

El valor del gap es proporcional a la suma de dichas contribuciones:

$$\Delta = \mathcal{D}_+ e^{S_+} + \mathcal{D}_- e^{S_-} \quad (3.33)$$

donde \mathcal{D}_{\pm} son prefactores asociados a las fluctuaciones gaussianas en torno a las soluciones estacionarias[6]. En vista de la total simetría entre los dos caminos instantonicos podemos

asumir con seguridad que $\mathcal{D}_+ = \mathcal{D}_- = \mathcal{D}$. En lo que sigue no evaluaremos \mathcal{D} y lo dejaremos como un factor de escala indeterminado. El gap va a ser acompañado por un factor igual a[6]:

$$\Delta = \Delta_0 \cos \left(S\pi \left(1 - \frac{\cos \theta_o}{\sqrt{1-\lambda}} \right) \right) \quad (3.34)$$

Donde Δ_0 es proporcional a:

$$\Delta_0 = K \exp \left(-S \left(\log \left(\frac{\sqrt{1-\cos^2 \theta_o} + \sqrt{\lambda}}{\sqrt{1-\cos^2 \theta_o} - \sqrt{\lambda}} \right) - \frac{\cos \theta_o}{\sqrt{1-\lambda}} \log \left(\frac{\sqrt{(1-\cos^2 \theta_o)(1-\lambda)} + \cos \theta_o \sqrt{\lambda}}{\sqrt{(1-\cos^2 \theta_o)(1-\lambda)} - \cos \theta_o \sqrt{\lambda}} \right) \right) \right)$$

Considerando el término oscilatorio podemos dar una explicación inmediata a la propiedad de spines semienteros vista en el capítulo anterior. Vimos que el caso de spines semientero existia un congelamiento del efecto túnel directamente a campo nulo. La ecuación anterior reproduce ese comportamiento trivialmente. El numero de ceros estan topologicamente determinados por [6]:

$$\begin{aligned} S\pi \left(1 - \frac{\cos \theta_o}{\sqrt{1-\lambda}} \right) &= \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ \frac{\cos \theta_o}{\sqrt{1-\lambda}} &= \frac{1}{S} \left(S - \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \right) \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$-1 \leq \frac{\cos \theta_o}{\sqrt{1-\lambda}} \leq 1 \quad (3.36)$$

Esta inecuación desde el punto de vista de la ecuación (2.36), se puede interpretar

$$\begin{aligned} -S &\leq S - \left(n + \frac{1}{2} \right) \leq S \\ -2S &\leq - \left(n + \frac{1}{2} \right) \leq 0 \end{aligned}$$

El espectro para n esta determinado por

$$-\frac{1}{2} \leq n \leq 2S - \frac{1}{2} \quad (3.37)$$

Con n entero, obtenemos $n = 0, 1, \dots, 2S - 1$.

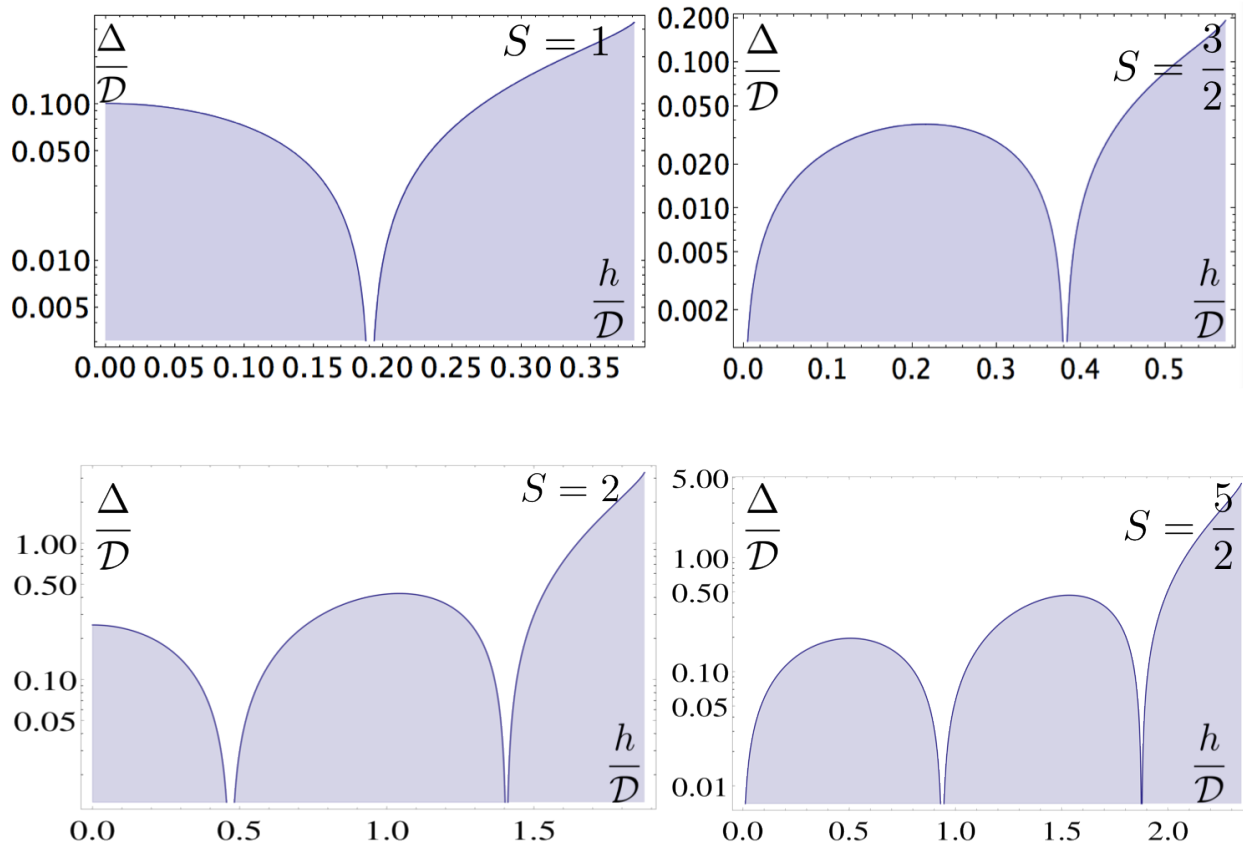


Figura 3.8: En la figura mostramos el gap en función del campo magnético según lo estimado por la aproximación de instantones. La similitud con los resultados exactos obtenidos en el capítulo anterior es evidente. El gap está expresado en unidades arbitrarias debido a que hay un factor de escala indeterminado.

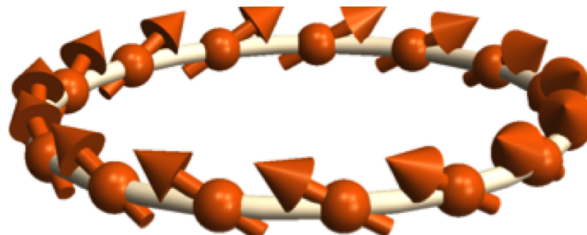
Capítulo 4

Anillo de Spin

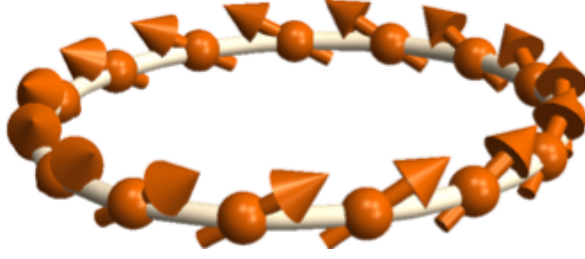
4.1. Introducción

El propósito de este capítulo es evidenciar el comportamiento colectivo que presentan ciertas configuraciones, como el cambio en la dirección de la vorticidad de un anillo con momentos magnéticos localizados. Como discutimos en el capítulo 2 estos sistemas pueden ser abordados mediante la reducción de grados de libertad electrónicos siendo efectivo en el límite de bajas temperaturas. Comenzando por la distribución de momentos magnéticos localizados a lo largo de una circunferencia y estudiando las interacciones a primeros vecinos encontraremos resultados sorprendentes.

Estas configuraciones son observadas experimentalmente en una variedad de moléculas que pertenecen a la familia de las ruedas férricas. Se han logrado manipular y controlar con gran precisión. Nosotros asumiremos un tipo de intercambio ferromagnético entre momentos magnéticos consecutivos, esta interacción da lugar a un comportamiento colectivo de los momentos magnéticos. Es decir, definiremos nuestro sistema con quiralidad siniestra $|\ominus\rangle$ aquella configuración que esta en el sentido de las agujas de un reloj.



y quiralidad diestra $|\oplus\rangle$ aquella que presenta una configuración en el sentido inverso de las agujas del reloj.

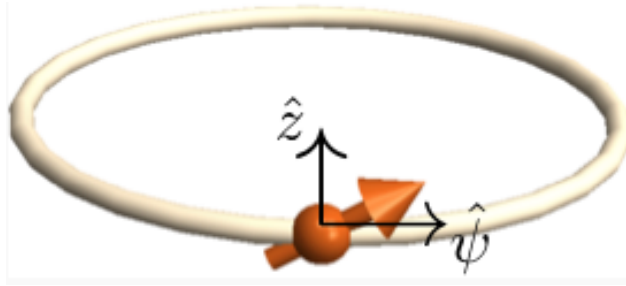


Nuestro estudio consistirá en determinar cual es la amplitud de probabilidad del proceso que transforma la configuración magnética del anillo de un estado en el otro. Esto es análogo al efecto túnel de una partícula a través de una barrera de potencial con la gran diferencia que se trata de una configuración colectiva y no una partícula puntual.

4.2. Hamiltoniano del anillo de spin

Para lo anterior, comenzaremos describiendo un momento magnético mediante un Hamiltoniano de spin.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{ani}} + \mathcal{H}_{\text{ex}} + \mathcal{H}_{\text{zee}} \quad (4.1)$$



Notemos que este problema fue resuelto en el capítulo anterior para un spin aislado.

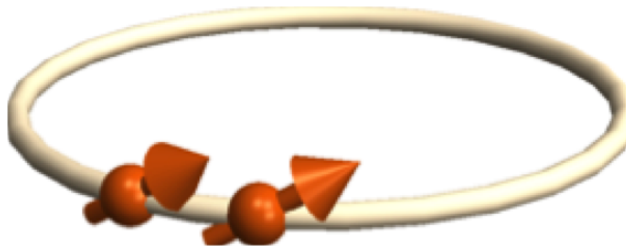
La contribución energética local puede representarse a través de:

$$\mathcal{H}_{\text{ani}} = -\mathcal{D} \sum_i (\vec{S}_i \cdot \hat{\psi}_i)^2 + \mathcal{E} \sum_i \left((\vec{S}_i \cdot \hat{z})^2 - (\vec{S}_i \cdot \hat{\rho}_i)^2 \right) \quad (4.2)$$

El termino de Zeeman expone un acople al campo magnético externo de la forma:

$$\mathcal{H}_{\text{zee}} = -\gamma H \sum_i S_i^z \quad (4.3)$$

Finalmente completaremos el sistema con el término de intercambio ferromagnético, este término es de gran importancia debido a que articula el comportamiento colectivo,

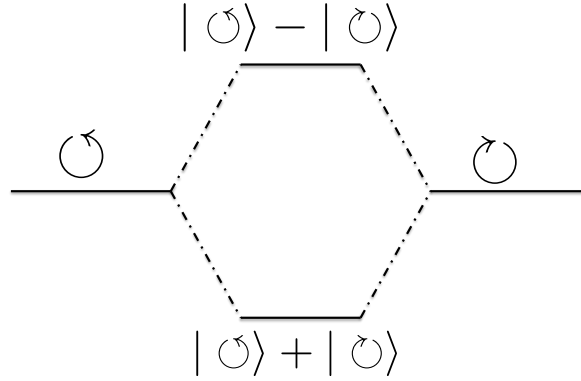


este término es:

$$\mathcal{H}_{\text{ex}} = -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (4.4)$$

4.3. Gap asociado a la quiralidad

Clásicamente las dos posibles configuraciones que minimizan la energía son degeneradas en los dos primeros niveles energéticos, siendo estos descritos por los estados que representan ambas configuraciones. Esta degeneración desaparece al considerar las fluctuaciones cuánticas, debido a que generan una brecha entre los niveles de energía mas bajos. Esta brecha da cuenta del efecto túnel entre los estados que describen ambas quiralidades. Esto se puede observar en la siguiente figura:



Como vimos en el capítulo 2 la brecha energética se puede determinar mediante el valor de expectación del operador de reversión:

$$\mathcal{R} |\curvearrowright\rangle = |\curvearrowleft\rangle \quad (4.5)$$

$$\mathcal{R} |\curvearrowleft\rangle = |\curvearrowright\rangle \quad (4.6)$$

El operador \mathcal{R} revierte punto a punto el sentido del vector tangente al anillo. A bajas temperaturas dicho valor de expectación se relaciona directamente con el gap, según muestra la ecuación (2.11). Adicionalmente podemos determinar el valor de \mathcal{R} mediante el uso de instantones que es lo que procedemos a hacer. Primero parametrizamos la orientación de cada momento magnético según:

$$\hat{\Omega}_i = \sin \Theta_i \sin \Psi_i \hat{\rho}_i + \sin \Theta_i \cos \Psi_i \hat{\psi}_i + \cos \Theta_i \hat{z} \quad (4.7)$$

donde $\hat{\rho}_i$, $\hat{\psi}_i$ son vectores radiales y tangentes a la circunferencia en la posición de cada momento. Procedemos a escribir una acción que representa el comportamiento colectivo:

$$\mathcal{S} = iS \sum_i (1 - \cos \Theta_i) d\Phi_i - \mathcal{H}(\hat{\Omega}_i) \quad (4.8)$$

El tratamiento de la amplitud de reversión a partir de esta acción es muy complicada debido a la gran cantidad de grados de libertad. Las ecuaciones semiclásicas de movimiento para

$\Omega_i(\tau)$ se obtienen variando la acción. El resultado es la célebre ecuación de Landau-Lifshitz en tiempo imaginario:

$$i \frac{d\Omega_i}{d\tau} = \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \Omega_i} \times \Omega_i.$$

La derivada de la energía se puede obtener directamente y es igual a:

$$\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \Omega_i} = \frac{\delta \mathcal{H}_{\text{local}}}{\delta \Omega_i} + J (\Omega_{i-1} + \Omega_{i+1}),$$

donde hemos separado la contribución del término local de energía (anisotropía y Zeeman) del intercambio que acopla la dinámica de cada spin con la de sus vecinos. Notemos que la ecuación de Landau-Lifshitz escrita en términos de los ángulos polares Θ_i y Φ_i se transforma en una ecuación independiente de la etiqueta i . Lo anterior es debido a la simetría axial del problema en consideración. Basados en esta simetría podemos avanzar si hacemos una aproximación basada en problemas similares enfrentados en el contexto clásico.

En [7] se estudia la dinámica de paredes de dominio magnéticas clásicas, en particular se estudia la dinámica de paredes de tipo vortice. En dicho estudio se hizo el ansatz de movimiento colectivo de la magnetización que permitía reducir el número de grados de libertad a solo dos, los que procederemos a describir a continuación. Dicho ansatz ha resultado ser muy eficiente en la descripción de la dinámica de paredes de dominio y ha sido comparado exitosamente con simulaciones numéricas exactas de las ecuaciones clásicas de movimiento. A continuación suponemos un comportamiento colectivo durante la reversión. Para tal efecto consideramos que $\Theta_i = \Theta$ y $\Psi_i = \Psi$, este supuesto refleja el comportamiento colectivo entre los momentos magnéticos. Este ansatz impone una reversión colectiva en contraste con otros tipos de reversión como paredes de dominio u ondas de spin. Este supuesto tendrá validez cuando el valor de J sea lo suficientemente grande comparado con las demás escalas energéticas. Sin embargo en este trabajo no abordaremos el estudio del rango de validez del ansatz dicho análisis se ha dejado para un estudio posterior.

La acción efectiva para las coordenadas colectivas se obtiene reemplazando en la acción (4.8) el ansatz de movimiento colectivo. El resultado es:

$$\mathcal{S} = iS\mathcal{N} (1 - \cos \Theta) d\Phi - \mathcal{H}_{\text{eff}}(\hat{\Omega}). \quad (4.9)$$

Para determinar $\mathcal{H}_{\text{eff}}(\hat{\Omega})$ procedemos como sigue. En base a nuestra definición de los ejes coordenados tenemos las siguientes relaciones:

$$\hat{\rho}_i \cdot \hat{\rho}_{i+1} = \hat{\psi}_i \cdot \hat{\psi}_{i+1} = \cos \delta\phi,$$

además

$$\hat{\rho}_i \cdot \hat{\psi}_{i+1} = \hat{\psi}_i \cdot \hat{\rho}_{i+1} = \sin \delta\phi,$$

donde

$$\delta\phi = \frac{2\pi}{N}.$$

Reuniendo estos resultados obtenemos finalmente que la proyección entre dos momentos magnéticos consecutivos esta dado por:

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} = S^2 \sin^2 \Theta (\cos \delta\phi + \cos \Psi \sin \Psi \sin \delta\phi) + S^2 \cos^2 \Theta. \quad (4.10)$$

El Hamiltoniano adquiere un término dependiente del número de sitios en consideración:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} = & -\mathcal{N}S^2 \sin^2 \Theta \cos^2 \Psi + \mathcal{N}S^2 \varepsilon (\cos^2 \Theta - \sin^2 \Theta \sin^2 \Psi) \\ & -\mathcal{N}S^2 j (\cos^2 \Theta + \sin^2 \Theta (\cos \delta\phi + \sin 2\Psi \sin \delta\phi)) - \mathcal{N}Sh \cos \Theta. \end{aligned} \quad (4.11)$$

En esta última ecuación hemos definido:

$$\varepsilon = \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{D}}, \quad j = \frac{\mathcal{J}}{\mathcal{D}} \quad \text{y} \quad h = \frac{\gamma H}{\mathcal{D}}.$$

4.4. Spin efectivo asociado a la quiralidad

Podemos asociar la acción efectiva referida a la reversión de la vorticidad con un Hamiltoniano de spin efectivo dado por:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \frac{1}{\mathcal{N}} \left(-S_x^2 + \varepsilon (S_z^2 - S_y^2) - \mathcal{N}hS_z - j(1 - \cos \delta\phi) S_z^2 - j \sin \delta\phi (S_x S_y + S_y S_x) \right). \quad (4.12)$$

El último término ha sido simetrizado para garantizar la hermiticidad del Hamiltoniano. Esta ecuación determina la energía de las distintas orientaciones. La magnitud del spin, por otro lado, esta dado por el término de fase de Berry obtenida anteriormente el cual corresponde a un spin de magnitud $\mathcal{N}S$. El comportamiento del gap para este Hamiltoniano y por lo tanto para el sistema colectivo es presentado como función de h para $j = 0,2$ en la gráfica de la figura 4.1. En ellas se observa un claro comportamiento que indica que hay oscilaciones en las que se manifiesta la interferencia destructiva de dos modos de reversión como se ilustra en la figura 5.2.

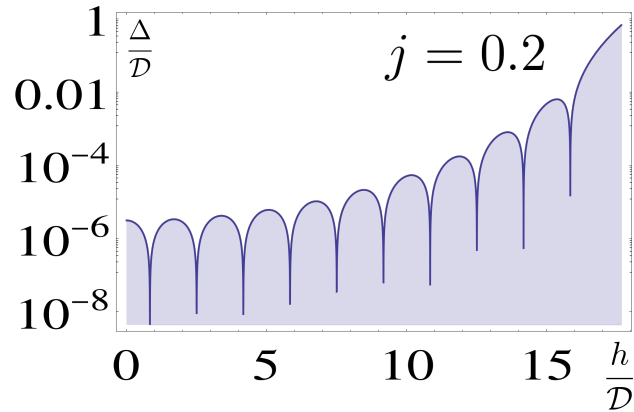


Figura 4.1: Comportamiento del gap como función de h para $j = 0,2$. En este gráfico hemos considerado $S = 1$ y $\mathcal{N} = 10$. Para este cálculo hemos considerado un spin efectivo con Hamiltoniano en la ecuación 4.12.

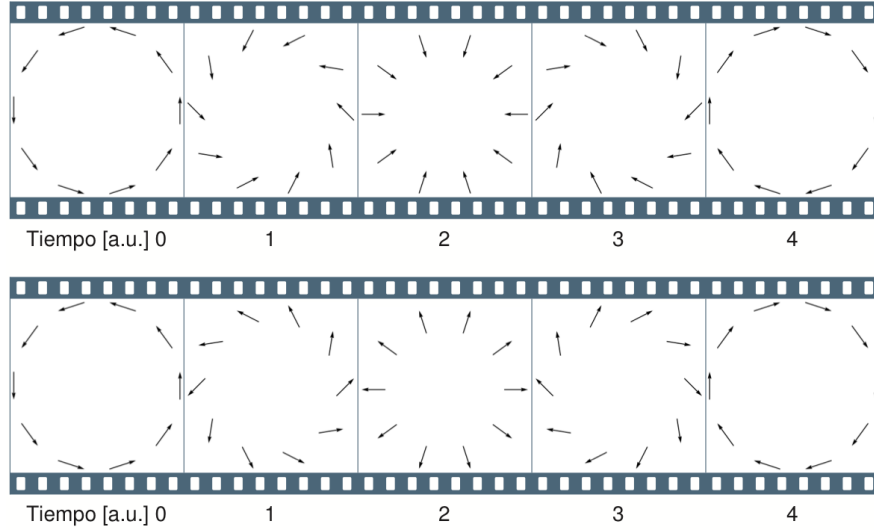


Figura 4.2: *Dos caminos de reversión que interfieren destructivamente para ciertos valores del campo magnético.*

Cuando el número de momentos \mathcal{N} es grande, es decir $\delta\phi \ll 1$, podemos hacer las siguientes aproximaciones $\sin\delta\phi \approx 0$ y $\cos\delta\phi \approx 1$. El Hamiltoniano adquiere la siguiente forma:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{\mathcal{N}}S_x^2 + \frac{\varepsilon}{\mathcal{N}}(S_z^2 - S_y^2) - hS_z. \quad (4.13)$$

Notemos que el resultado obtenido es equivalente a la ecuación (3.20). Por lo tanto logramos el mismo comportamiento para el gap gobernado por un spin efectivo $S_{\text{ef}} = \mathcal{N}S$:

$$\Delta = \Delta_0 \cos\left(\mathcal{N}S\pi\left(1 - \frac{\cos\theta_o}{\sqrt{1-\lambda}}\right)\right). \quad (4.14)$$

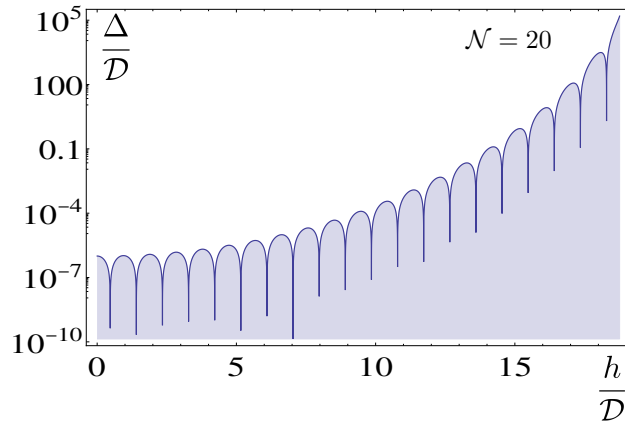


Figura 4.3: *Comportamiento analítico del gap en función del campo magnético para $\mathcal{N} = 20$ y $\mathcal{E}/\mathcal{D} = 0,3$. Observamos oscilaciones que reflejan la interferencia entre los distintos modos de reversión de la vorticidad. Dichas interferencias son consecuencia del comportamiento colectivo.*

4.5. Conclusión

En conclusión hemos descrito el proceso de reversión de la vorticidad de la magnetización de un anillo magnetico en términos de un spin efectivo, de magnitud $\mathcal{N}S$. Hemos diagonalizado numéricamente el Hamiltoniano para ese spin efectivo y verificado que manifiesta claros indicios del fenómeno de congelamiento topológico del efecto túnel. Este comportamiento se puede entender en términos de la interferencia destructiva de caminos de reversión complementarios. Adicionalmente hemos logrado, en el límite $\mathcal{N} \gg 1$, reducir el Hamiltoniano efectivo al Hamiltoniano del capítulo anterior y así obtener una expresión analítica para el gap que demuestra el congelamiento topológico del efecto túnel.

Capítulo 5

Conclusión

En este trabajo hemos hecho tres cosas.

1. Hemos revisado numérica y analíticamente el fenómeno de congelamiento topológico del efecto túnel.
2. Hemos establecido un modelo efectivo para la reversión de la vorticidad de un anillo magnético en términos de un spin ficticio de magnitud $\mathcal{N}S$, donde \mathcal{N} es el número de componentes del anillo.
3. Hemos resuelto el modelo anterior usando técnicas numéricas y analíticas ilustrando que la reversión de la vorticidad manifiesta el fenómeno de congelamiento topológico del efecto túnel.

Nuestro estudio comenzó con la presentación de los resultados numéricos para un spin aislado. Los resultados fueron sorprendentes, pues la amplitud de túnel mostraba oscilaciones misteriosas que crecían conforme crecía el tamaño del spin.

Un efecto notable que se encontró asociado a estas oscilaciones fue el congelamiento absoluto del efecto túnel para ciertos valores específicos del campo magnético. Dicho efecto se conoce como el congelamiento topológico del efecto túnel y ha sido objeto de una gran variedad de estudios tanto teóricos como experimentales. Para dar con una interpretación física de dichas oscilaciones nuestra presentación prosiguió con un desvío.

Se presentó una representación de la amplitud de túneleo en términos de integrales de camino. Para tal efecto usamos la representación de estados coherentes de spin. Esta representación difiere de las usuales en que constituye una expansión de los estados de spin en una base sobre completa. En términos de dicha base la amplitud de túnel queda expresada como una suma sobre todos los caminos posibles de reversión. Cada camino contribuye a la suma un término identificable con la exponencial de la acción clásica asociada al camino:

$$\mathcal{S}_E = \int_0^T d\tau \left(\frac{i\hbar}{2}(1 - \cos\theta)\dot{\phi} - \mathcal{H}(\hat{\Omega}) \right). \quad (5.1)$$

Notamos en este punto que la acción contiene un término que no está relacionado con la energía de las diferentes orientaciones de spin. Es un término puramente geométrico cono-

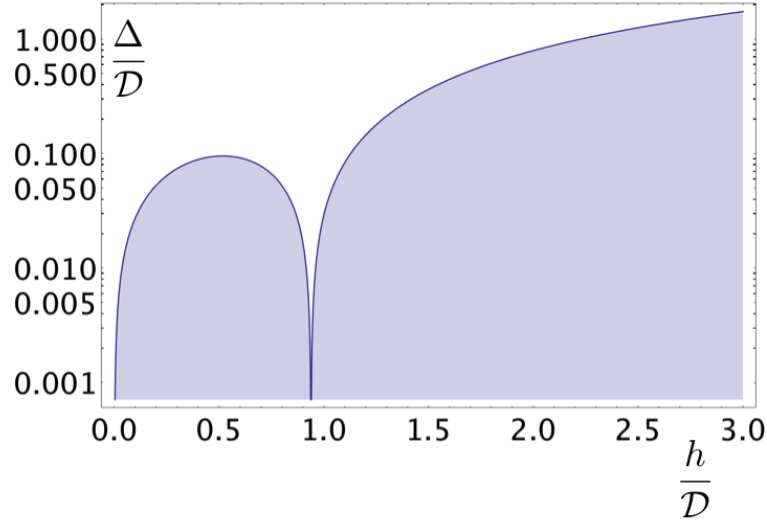
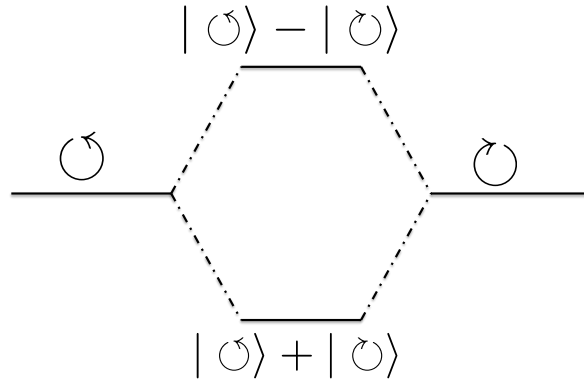


Figura 5.1: *En este gráfico se muestra el comportamiento de la brecha energética en función del campo magnético. Se observan dos puntos en los cuales el gap se anula uno de los cuales se encuentra a campo cero.*

cida como la fase de Berry. El origen de las misteriosas oscilaciones sería posteriormente identificado directamente en la presencia de ese término.

La siguiente parada para lograr descifrar las oscilaciones misteriosas fue el uso de un método llamado aproximación semiclásica. Dicho método consiste esencialmente en considerar a S (la magnitud del spin) como un parámetro grande. En dicho caso es posible aproximar la suma sobre todos los caminos por la suma sobre aquellos de mínima acción. Dada la simetría del problema siempre es posible encontrar dos de dichos caminos correspondientes a reversiones por sentidos opuestos. La fase de Berry de dichos caminos interfiere destructivamente para ciertos valores del campo magnético. Esta interferencia es precisamente el origen de los ceros del gap y del consiguiente congelamiento del efecto túnel.

Establecidos dichos resultados proseguimos nuestra investigación para estudiar el sistema de un anillo magnético con \mathcal{N} momentos magnéticos localizados alrededor del perímetro de una circunferencia. Para dicho anillo estudiamos el correspondiente problema de reversión, mediante efecto túnel, de la vorticidad asociada a su magnetización. Comenzamos con un Hamiltoniano modelo que, por construcción, manifestaba la estabilidad de dos vorticidades opuestas. Dicho Hamiltoniano contenía tres tipos de contribuciones, una anisotropía local asociada a cada momento magnético del anillo, un acople ferromagnético que garantizaba la reversión colectiva del anillo y un término de campo magnético externo. Nuestro estudio se enfocó en el estudio del desdoblamiento mediante efecto túnel de las dos quiralidades como se ilustra en el siguiente diagrama:



Comenzamos el análisis de dicho modelo usando la técnica de integrales de camino. Haciendo el supuesto de que los caminos en que la reversión se lleva a cabo colectivamente son dominantes pudimos reducir el problema de reversión de la vorticidad al problema de un spin efectivo de magnitud $\mathcal{N}S$. Esta correspondencia permitió mostrar que existe el fenómeno oscilaciones en el gap correspondiente a la reversión de la vorticidad. Dichas oscilaciones corresponden a la interferencia de distintos caminos de reversión como se indica en la figura siguiente.

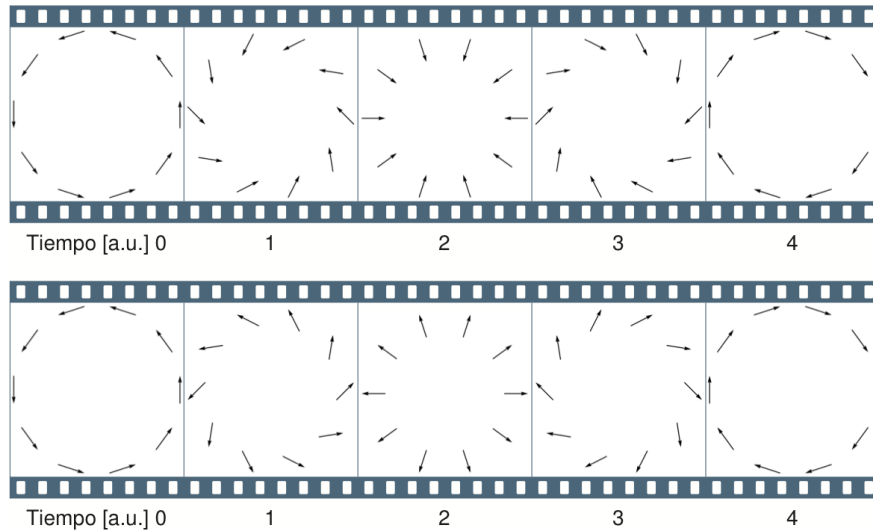


Figura 5.2: *Dos caminos de reversión que interfieren destructivamente para ciertos valores del campo magnético.*

Capítulo 6

Bibliografía

- [1] Assa Auerbach. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Springer-Verlag, New York, first edition, 1994.
- [2] Lapo Bogani and Wolfgang Wernsdorfer. Molecular spintronics using single-molecule magnets. *NATURE MATERIALS*, 7(3):179–186, MAR 2008.
- [3] David Bohm. *Quantum theory*. Dover, New York, first edition, 1989.
- [4] Sidney Coleman. *Aspects of Symmetry*. Cambridge University Press, reprint edition (february 26, 1988) edition, 1999.
- [5] Jacques Villain. Dante Gatteschi, Roberta Sessoli. *Molecular nanomagnets*. Oxford University Press, New York, first edition, 2006.
- [6] Anupam Garg. Topologically Quenched Tunnel Splitting in Spin Systems without Kramers' Degeneracy. *EUROPHYSICS LETTERS*, 22(3):205–210, 1993.
- [7] Pedro Landeros and A. S. Núñez. Domain wall motion on magnetic nanotubes. *J. Appl. Phys.*, 108:033917, 2010.
- [8] W Wernsdorfer and R Sessoli. Quantum phase interference and parity effects in magnetic molecular clusters. *SCIENCE*, 284(5411):133–135, APR 2 1999.

Apéndice A

Integrales de camino

Las integrales de camino en mecánica cuántica son una herramienta elegante y potente en el tratamiento de aproximación semiclásica, efectos de interferencia y el análisis del efecto túnel mediante el método de instantones. Antes de derivar las integrales de camino de spin comenzaremos con integrales de camino común.

Consideremos el propagador $K(x_i, x_f, T)$ el cual corresponde a la amplitud de probabilidad de localizar la partícula en $x = x_f$ en un tiempo $t = T$ dado que se encontraba inicialmente en $x = x_i$ en un tiempo $t = 0$. por tanto tenemos:

$$\begin{aligned} K(x_i, x_f, T) &= \langle x_f | e^{-i\mathcal{H}T/\hbar} | x_i \rangle \\ &= \langle x_N | e^{-i\varepsilon\mathcal{H}/\hbar} \mathbf{1} e^{-i\varepsilon\mathcal{H}/\hbar} \mathbf{1} \dots \mathbf{1} e^{-i\varepsilon\mathcal{H}/\hbar} | x_0 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

con $\varepsilon = T/N$, $x_0 = x_i$, $x_N = x_f$. Insertando $(N - 1)$ resoluciones de la identidad, posteriormente haremos el límite $N \rightarrow \infty$,

$$\mathbf{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_j |x_j\rangle \langle x_j|. \quad (\text{A.2})$$

Encontramos los siguientes elementos de matriz:

$$\begin{aligned} \langle x_{j+1} | e^{-i\varepsilon\mathcal{H}/\hbar} | x_j \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dp_j \langle x_{j+1} | p_j \rangle \langle p_j | e^{-i\varepsilon\mathcal{H}/\hbar} | x_j \rangle dx_j \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp_j \langle x_{j+1} | p_j \rangle \langle p_j | e^{-i\varepsilon\mathbf{T}/\hbar} e^{-i\varepsilon\mathbf{V}/\hbar} | x_j \rangle dx_j \\ &\approx \int_{-\infty}^{\infty} dp_j \langle x_{j+1} | p_j \rangle e^{\frac{-i\varepsilon\mathbf{p}_j^2}{2\hbar m}} e^{\frac{-i\varepsilon}{\hbar} V(x_j)} \langle p_j | x_j \rangle dx_j, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

donde hemos usado

$$\mathbf{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dp_j |p_j\rangle \langle p_j|. \quad (\text{A.4})$$

Por tanto, encontramos

$$K(x_{j+1}, x_j, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j \exp \left(+i\frac{\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{(x_{j+1} - x_j)p_j}{\varepsilon} - \left(\frac{p_j^2}{2m} + V(x_j) \right) \right) \right), \quad (\text{A.5})$$

$$K(x_{j+1}, x_j, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_i \exp\left(-i\frac{\varepsilon}{\hbar} (\dot{x}_j p_i - \mathcal{H})\right). \quad (\text{A.6})$$

Luego para la posición inicial y final antes mencionada, obtenemos:

$$K(x_N, x_0, T) = \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T (\dot{x}p - \mathcal{H}(x, p)) dt\right), \quad (\text{A.7})$$

con

$$\prod_i dq_i = \mathcal{D}q \quad \text{para } q = x, p.$$

De este modo el propagador queda expresado como la suma sobre todos los caminos de la exponencial de la acción.

$$K(x_N, x_0, T) = \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}\right). \quad (\text{A.8})$$

Apéndice B

Integrales de camino de spin

Para introducir el formalismo de integrales de camino para grados de libertad de spin es necesario utilizar el concepto de estados coherentes de spin. Los estados coherentes de spin $|\hat{\Omega}\rangle$ consisten en una rotación del estado de mínima incerteza $|m = +S\rangle$ considerando que este es el estado de máxima polarización. Desde esta perspectiva el estado $|\hat{z}\rangle$ representa un estado coherente, es decir $|\hat{\Omega}\rangle = |\hat{z}\rangle$. Para seguir consideraremos los estados que son generados por el elemento de $SU(2)$, \mathcal{R} que están parametrizados por los tres ángulos de Euler:

$$\mathcal{R} = \exp(-i\phi S^z) \exp(-i\theta S^y) \exp(-i\chi S^z). \quad (\text{B.1})$$

Por tanto expresaremos los estados coherentes de spin mediante:

$$|\hat{\Omega}\rangle = \mathcal{R}(\phi, \theta, \chi)|S, S\rangle \quad (\text{B.2})$$

donde $\hat{\Omega}$ corresponde al vector sobre la esfera unitaria que se asocia a los ángulos θ y ϕ . Observemos que tenemos la libertad de elegir χ arbitrariamente, es decir una libertad de gauge. Por tanto tenemos solo dos ángulos que importan θ y ϕ , los cuales están definidos en el siguiente dominio:

$$\{\theta \in [0, \pi], \phi \in [-\pi, \pi]\}.$$

El vector unitario es:

$$\hat{\Omega} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta). \quad (\text{B.3})$$

La amplitud de probabilidad para que un sistema de spin pase de la orientación Ω_0 a Ω_N en un tiempo T esta dada por:

$$\langle \Omega_N | e^{-i\mathcal{H}T/\hbar} | \Omega_0 \rangle = \langle \Omega_N | e^{-i\varepsilon\mathcal{H}/\hbar} \mathbf{1} e^{-i\varepsilon\mathcal{H}/\hbar} \mathbf{1} \dots \mathbf{1} e^{-i\varepsilon\mathcal{H}/\hbar} | \Omega_0 \rangle, \quad (\text{B.4})$$

donde hemos particionado el intervalo T en N partes iguales y definido $\varepsilon = T/N$. La resolución de la identidad en términos de estados coherentes de spin es:

$$\mathbf{1} = \frac{2S+1}{4\pi} \int |\hat{\Omega}\rangle \langle \hat{\Omega}| d\Omega \quad (\text{B.5})$$

Evaluando los elementos de matriz obtenemos:

$$\begin{aligned}
\langle \Omega_j | e^{-i\varepsilon\mathcal{H}/\hbar} | \Omega_{j-1} \rangle &\approx \langle \Omega_j | \mathbf{1} - i/\hbar \varepsilon \mathcal{H} | \Omega_{j-1} \rangle \\
&= \langle \Omega_j | \mathbf{1} | \Omega_{j-1} \rangle - i/\hbar \langle \Omega_j | \varepsilon \mathcal{H} | \Omega_{j-1} \rangle + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\
&= \langle \Omega_j | \Omega_{j-1} \rangle \left(1 - i/\hbar \frac{\langle \Omega_j | \varepsilon \mathcal{H} | \Omega_{j-1} \rangle}{\langle \Omega_j | \Omega_{j-1} \rangle} \right).
\end{aligned} \tag{B.6}$$

Finalmente encontramos:

$$\langle \Omega_j | e^{-i\varepsilon\mathcal{H}/\hbar} | \Omega_{j-1} \rangle = \langle \Omega_j | \Omega_{j-1} \rangle \exp \left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} H(\Omega_j | \Omega_{j-1}) \right), \tag{B.7}$$

donde

$$H(\Omega_j | \Omega_{j-1}) = \frac{\langle \Omega_j | \mathcal{H} | \Omega_{j-1} \rangle}{\langle \Omega_j | \Omega_{j-1} \rangle}.$$

Finalmente encontramos:

$$\begin{aligned}
\langle \Omega_N | e^{-iT\mathcal{H}/\hbar} | \Omega_0 \rangle &= \left(\frac{2S+1}{4\pi} \right)^{N-1} \int d\Omega_1 \cdots \int d\Omega_{N-1} \prod_{j=1}^{N-1} \langle \Omega_j | \Omega_{j-1} \rangle \exp \left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} H(\Omega_j | \Omega_{j-1}) \right) \\
&= \left(\frac{2S+1}{4\pi} \right)^{N-1} \int d\Omega_1 \cdots \int d\Omega_{N-1} \exp \left(-i\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_j \mathcal{A}(\Omega_j) \right),
\end{aligned} \tag{B.8}$$

con

$$\frac{\varepsilon}{\hbar} \mathcal{A}(\Omega_j) = \sum_{j=1}^N \left[\ln(\langle \Omega_j | \Omega_{j-1} \rangle) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(\Omega_j | \Omega_{j-1}) \right]. \tag{B.9}$$

Considerando una de las relaciones más importante de los estados coherentes de spin [1],

$$\langle \Omega_j | \Omega_{j-1} \rangle = \exp \left(-i\varepsilon S \left(\dot{\phi}_j \cos \theta_j \right) \right) \tag{B.10}$$

donde hemos definido: $\dot{\phi}_j = 1/\varepsilon (\phi_j - \phi_{j-1})$. En el límite $N \gg 1$ podemos entender la suma en j como una integral. De esta forma el exponente se puede escribir como:

$$\mathcal{A} = \int \left(-S \dot{\phi}(\tau) \cos \theta(\tau) + H(\Omega(\tau)) \right) d\tau \tag{B.11}$$

Esta ecuación muestra que la acción se descompone en dos contribuciones, una dependiente de la energía y otra puramente geométrica.

De esta manera concluimos que:

$$\langle \Omega(t = \tau) | e^{(-i\tau H/\hbar)} | \Omega(t = 0) \rangle = \int \mathcal{D}\Omega e^{iS\mathcal{A}(\Omega)/\hbar}.$$

Apéndice C

Fase de Berry

Consideremos un sistema cuyo Hamiltoniano depende lentamente del tiempo $\mathcal{H}(t)$. En cada instante de tiempo el sistema puede ser descrito mediante una base de autoestados de $\mathcal{H}(t)$:

$$\mathcal{H}(t)|\Psi_\mu(t)\rangle = E_\mu(t)|\Psi_\mu(t)\rangle. \quad (\text{C.1})$$

Si el Hamiltoniano varia a un ritmo suficientemente lento es posible demostrar la siguiente propiedad: si el sistema se encuentra inicialmente en el estado fundamental permanecerá en él. Este hecho se conoce como el teorema adiabático y es ampliamente discutido en los textos de mecánica cuántica. Consideremos el estado mecánico cuántico que resulta de evolucionar el estado basal:

$$|\Psi(t)\rangle = \lambda(t)|\Psi_0(t)\rangle.$$

Como el estado $|\Psi(t)\rangle$ obedece la ecuación de Schrodinger:

$$-i\partial_t|\Psi(t)\rangle = \mathcal{H}(t)|\Psi(t)\rangle,$$

llegamos a una ecuación para λ

$$-i\dot{\lambda} - i\lambda\langle\Psi_0|\partial_t|\Psi_0\rangle = \lambda E_0(t).$$

La solución de esta ecuación diferencial de primer orden es:

$$\lambda(t) = \exp\left(i\int_{t_i}^{t_f} E_0(t)dt + i\int_{t_i}^{t_f} \langle\Psi_0|i\partial_t|\Psi_0\rangle dt\right).$$

Es fácil reconocer el primer término como la fase dinámica asociada a la evolución temporal. Sin embargo el segundo término requiere una explicación más sutil. Primero notemos que también se trata de una fase, este hecho es evidente al notar que $\langle\Psi_0|\partial_t|\Psi_0\rangle$ es un número imaginario puro. Esto se debe a la condición de normalización que el estado $|\Psi_0\rangle$ satisface en cada instante. Por tanto denominaremos al segundo término como la fase de Berry en honor a su descubridor. Una propiedad interesante de la fase de Berry es su naturaleza geométrica. Esto significa que la fase de Berry asociada a un proceso particular depende exclusivamente de la forma del camino que describe el Hamiltoniano y no de la parametrización temporal de este.

Notemos la estrecha relación que hay entre la fase de Berry recién descrita y el término que denominamos fase de Berry en la integral de camino de spin. Este último término aparece a través de la expresión $\langle \Omega_j | \Omega_{j-1} \rangle$ que se puede interpretar como la versión discretizada de la fase de Berry.