

FILLIPI KLOS RODRIGUES DE CAMPOS

**ESTUDO DO EFEITO MASER EM SISTEMAS
MAGNÉTICOS NANOMÉTRICOS**

CURITIBA

DEZEMBRO 2011

FILLIPI KLOS RODRIGUES DE CAMPOS

**ESTUDO DO EFEITO MASER EM SISTEMAS
MAGNÉTICOS NANOMÉTRICOS**

Dissertação apresentada como requisito parcial
à obtenção do grau de Mestre em Engenharia
Elétrica, pelo Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Elétrica do Setor de Tecnologia da
Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. César Augusto Dartora

CURITIBA

DEZEMBRO 2011

C198 Campos, Fillipi Klos Rrodrigues de
Estudo do efeito maser em sistemas magnéticos nanométricos /
Fillipi Klos Rrodrigues de Campos . – Curitiba, 2011.
119 f. : il., tabs.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Paraná,
Setor de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Elétrica.

Orientador: Cesar Augusto Dartora

1.Masers. 2. Sistemas nanoeletrônicos. I. Universidade Federal
do Paraná. II. Dartora, Cesar Augusto. III. Título.

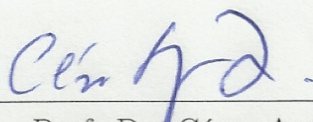
CDD: 621.381336

Termo de Aprovação

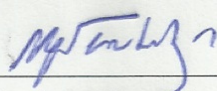
FILLIPI KLOS RODRIGUES DE CAMPOS

ESTUDO DO EFEITO MASER EM SISTEMAS MAGNÉTICOS NANOMÉTRICOS

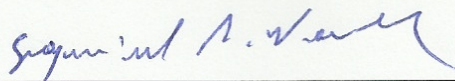
Dissertação aprovada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Elétrica, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica do Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná, pela seguinte banca examinadora:



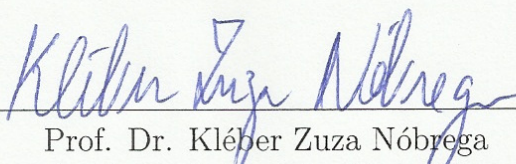
Prof. Dr. César Augusto Dartora
Universidade Federal do Paraná



Prof. Dr. Horácio Tertuliano dos Santos
Filho
Universidade Federal do Paraná



Prof. Dr. Ezequiel Burkarter
Instituto Federal do Paraná



Prof. Dr. Kléber Zuza Nóbrega
Instituto Federal do Maranhão

Dedicatória

Aos Meus Pais, Josué e Isabel, minha irmã Allini e
minha namorada, Camila.

Agradecimentos

Ao meu orientador César Dartora, por acreditar em meu potencial e me ajudar em incontáveis situações;

Aos professores da banca de defesa;

Ao coordenador, prof. Evelio Fernández, à secretária Raquel Forte e aos professores Horácio Tertuliano e Alexandre Aoki pela ajuda em todas as etapas do Mestrado;

Aos meus pais, Josué e Isabel pelo suporte e preocupação desde até antes do meu nascimento;

À minha namorada, Camila pelo apoio e por sempre compreender minha necessidade de me isolar para estudar;

À minha irmã Allini e ao meu cunhado Lucas que sempre me deram boas dicas;

À minha madrinha Sandra e ao meu padrinho Dalvir, que sempre foram verdadeiras inspirações;

A todos os parentes e agregados que me apoiaram;

Aos Professores do Mestrado e da Graduação, em especial os professores Lauro Samojeden, Tânia Garcia, Sérgio Berleze e Jair Lucinda por darem o exemplo e me inspirarem na minha profissão;

Aos meus professores de Ensino Fundamental, Médio e Técnico, em especial os professores José Gonçalves e Cláudia Recco, que foram essenciais para minha formação;

Aos meus amigos Diego Santos, Manoel Vieira, Rui Gustavo, Felipe Onishi e todo o pessoal do colégio e da graduação, que compreenderam minha ausência em uma série de eventos;

Aos coordenadores e Professores do Centro de Educação Tecnológica Tupy que me ajudaram quando tive que me ausentar do trabalho pelo Mestrado;

Aos professores José Tanaka e Ernesto Weins pela oportunidade de lecionar pela primeira vez;

A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização e divulgação deste trabalho.

Epígrafe

“Se A é o sucesso, então $A = X + Y + Z$. O trabalho é X ; Y é o lazer; e Z é manter a boca fechada.”

–Albert Einstein

“Ei mãe, eu tenho uma guitarra elétrica. Durante muito tempo isso foi tudo o eu queria ter. Mas, ei mãe, alguma coisa ficou pra trás. Antigamente eu sabia exatamente o que fazer. (...) Mas, ei mãe, por mais que a gente cresça, há sempre alguma coisa que a gente não consegue entender.”

–Humberto Gessinger

“Resistente, altamente contagiosa. Uma vez que uma ideia toma conta do cérebro é quase impossível erradicá-la. Uma pessoa pode encobri-la, ignorá-la, mas ela permanece lá.”

– Dom Cobb (Leonardo di Caprio) em *A Origem (Inception)*

Sumário

Lista de Figuras	viii
Lista de Tabelas	x
Lista de Siglas	xi
Resumo	xii
Abstract	xiii
1 Introdução	1
1.1 A Física Mesoscópica e a Spintrônica	1
1.2 Spintrônica na Computação Quântica	6
1.3 Histórico do MASER.....	7
1.4 Justificativa e Objetivos	9
1.5 Estrutura da dissertação.....	10
2 Fundamentação Teórica	12
2.1 Formulações Lagrangiana e Hamiltoniana	12
2.1.1 O Princípio da Mínima Ação	13
2.1.2 Equações de Hamilton	14
2.2 Indistinguibilidade e simetria.....	16
2.3 Segunda quantização e Operadores.....	17
2.3.1 Bósons e férmions.....	19
2.3.2 Procedimento padrão de segunda quantização	22

2.4	Hamiltoniano de Transferência	24
2.5	Regra de Ouro de Fermi	27
2.6	Distribuição de Fermi-Dirac	28
2.7	Correntes de Spin	30
2.8	Tunelamento com conservação de Spin.....	32
3	Ação MASER e aproximações clássicas.....	34
3.1	MASER: fundamentos.....	34
3.1.1	Cavidade Ressonante e Fator de Qualidade (Q)	36
3.2	Equações de Taxa	38
4	Análise dos Resultados.....	40
4.1	Equações de Taxa e Efeito MASER	43
4.1.1	Densidade de spin e densidade de corrente de spin.....	44
4.1.2	Aplicação das equações de taxa	46
4.2	Reparametrização das correntes de spin.....	48
4.3	Análise gráfica	50
4.3.1	Dimensionamento da cavidade ressonante	50
4.3.2	Dimensionamento da MTJ	52
5	Conclusão e Perspectivas Futuras	56
5.1	Perspectivas Futuras: Geração de Efeito MASER a partir de um Ferrofluido ..	56
5.1.1	Ferrofluido	57
5.1.2	Experimento Proposto.....	57
	Referências	59
	Apêndice A – Formulações Lagrangiana e Hamiltoniana aplicadas a um circuito LC	65

A.1	Formulação Lagrangiana.....	67
A.2	Formulação Hamiltoniana.....	67
	Anexo A - Artigo publicado	70

Lista de Figuras

Figura 1	Escalas microscópica, mesoscópica e macroscópica	3
Figura 2	Configurações de Junções de Tunelamento Magnéticas.	4
Figura 3	Configurações de magnetização de uma MTJ.	4
Figura 4	Magnetorresistência de três super-redes Fe/Cr a 4,2 K.	5
Figura 5	Átomos de amônia com diferentes níveis de energia.	8
Figura 6	Diagrama de montagem do MASER de amônia.	9
Figura 7	Junção de Tunelamento Magnética	26
Figura 8	Função de distribuição de Fermi-Dirac a três temperaturas	30
Figura 9	Correntes elétricas e de spin	31
Figura 10	Representação gráfica de processos de emissão e absorção de fótons por um elétron em um sistema de dois níveis.	35
Figura 11	Largura de banda ($\Delta\omega$) de um oscilador amortecido.	37
Figura 12	Sistema de dois níveis	38

Figura 13	Tunelamento entre dois ferromagnetos com <i>spin-flip</i> .	50
Figura 14	Cavidade Ressonante	51
Figura 15	Número de fótons <i>versus</i> diferença de potencial aplicada.	55
Figura 16	MASER baseado em ferrofluido	57
Figura 17	Circuito LC	65

Lista de Tabelas

Tabela 1	Diferenças principais entre Bósons e Férmions	17
Tabela 2	Condutividades elétricas e os respectivos fatores de qualidade para a cavidade apresentada neste trabalho.	52
Tabela 3	Algumas MTJs de três camadas estudadas em trabalhos desde 1975. ..	52
Tabela 4	Níveis de Energia de Fermi para diferentes metais	53

Lista de Siglas

MTJ	<i>Magnetic Tunnel Junction</i> - Junção de Tunelamento Magnética
DNA	<i>Deoxyribonucleic Acid</i> - Ácido Desoxirribonucleico
FMC	Física da Matéria Condensada
RAM	<i>Random Access Memory</i> - Memória de Acesso Randômico
GMR	<i>Giant Magneto Resistance</i> - Magnetorresistência Gigante
MRAM	<i>Magneto-resistive Random Access Memory</i> - Memórias de Acesso Randômico Magnetorresistivas
CPP	<i>Current Perpendicular to the Plane</i> - Corrente perpendicular ao plano (das camadas)
CIP	<i>Current In Plane</i> - Corrente no plano (das camadas)
MASER	<i>Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation</i> - Amplificador de Microondas por Emissão Estimulada de Radiação
RF	Rádio-frequência
LASER	<i>Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation</i> - Amplificador de Luz por Emissão Estimulada de Radiação
OEM	Onda Eletromagnética
OHS	Oscilador Harmônico Simples

Resumo

Junções de tunelamento magnéticas (MTJs) são usadas em diversas aplicações tecnológicas atuais, tais como cabeças de leitura magnetorresistivas, sensores de campo magnético e Memórias de Acesso Randômico Magnéticas (MRAMs), devido ao seu efeito de magnetorresistência gigante, cujas raízes estão ligadas a um mecanismo de espalhamento com uma forte dependência de spin. Evidências a favor da existência de correntes de spin colocam em questão a possibilidade de gerar radiação coerente de microondas em um meio com inversão de população de spin, mantido por uma corrente spin-polarizada. Para responder a essa questão, considerou-se uma junção de tunelamento magnética dentro de uma cavidade ressonante como um sistema promissor. A MTJ é composta por dois eletrodos ferromagnéticos separados por um filme fino de óxido que representa uma barreira de potencial devido ao fato de ter os níveis de Fermi das camadas ferromagnéticas situados na banda proibida (*bandgap*) do filme de óxido. O modelo completo baseia-se em um Hamiltoniano de transferência para determinar a corrente elétrica de tunelamento, bem como a magnitude da corrente de spin. Equações de taxa fenomenológicas são utilizadas para determinar a taxa de emissão de fótons e a potência de saída, onde a injeção de uma corrente polarizada em spin responsável pelo efeito de inversão de população é determinada pela física da junção de tunelamento magnética. O valor de limiar da corrente de spin para que ocorra ação MASER é estimada com base em valores típicos das grandezas relevantes, como as densidades de estados dos eletrodos ferromagnéticos. Mostrou-se que existe uma grande semelhança entre o comportamento de um LASER semiconductor e o MASER baseado em spin.

Palavras-chave: Junção de Tunelamento Magnética; MASER; Corrente de Spin; Cavidade Ressonante.

Abstract

Magnetic tunnel junctions (MTJs) are currently being used in many technological applications, such as magnetoresistive reading heads, magnetic field sensors and Magnetic Random Access Memories (MRAMs), due to its giant magnetoresistance effect whose roots are linked to strong spin-dependent scattering mechanisms. Evidence in favor of the existence of spin currents posed us the question over the possibility to generate coherent microwave radiation in a spin inverted population medium, maintained through a spin-polarized current. To answer that we considered magnetic tunnel junction placed inside a resonant cavity as a promising system. The MTJ is composed by two ferromagnetic electrodes separated by a thin oxide film which represents a potential barrier due to the fact that the Fermi levels of the ferromagnetic layers are situated in the gap region of the oxide film. The theoretical model is based on the transfer Hamiltonian method to estimate tunnel current as well as the spin-polarized current. Phenomenological rate equations are used to obtain the rate of photon emission and output power of the device, controled by the injection of a spin-polarized current in order to maintain population inversion. The spin current is mainly determined by physics of the magnetic tunnel junction. The threshold value of the spin current is estimated through the use of typical values for the relevant physical quantities, such as the densities of states of the ferromagnetic electrodes. A great resemblance between the behavior of a semiconductor LASER and the spin-based MASER is achieved.

Keywords: Magnetic Tunnel Junction; MASER; Spin Current; Resonant Cavity.

1 Introdução

Richard Feynman proferiu uma palestra para a Sociedade Americana de Física em 1959 intitulada “*There’s Plenty of Room at the Bottom*” (em tradução livre: “há muito espaço lá em baixo”), prevendo uma série de avanços científicos das décadas seguintes. Tendo como ponto de partida os conceitos de armazenamento de informação em sistemas biológicos microscópicos (como o DNA) e aplicando-os às leis físicas conhecidas na época, Feynman afirmou que a miniaturização de dispositivos eletrônicos poderia ser realidade em poucos anos, dependendo somente de avanços tecnológicos e não de descobertas científicas elementares. Ele utilizou o conceito de pessoas construindo pequenos dispositivos capazes de construir dispositivos menores ainda, procurando chegar a dimensões impossíveis a mãos humanas e prevendo, inclusive, dificuldades relacionadas com a miniaturização, como a magnetização de pequenas estruturas. Assim, ele inaugurou um novo campo de estudos: a nanotecnologia. Ela é multidisciplinar pois abrange conhecimentos nas áreas de física, medicina, eletrônica, ciência da computação, química, biologia e engenharia dos materiais, além de se basear na construção de materiais e estruturas na escala nanométrica (na escala de $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$) (FEYNMAN, 1959).

1.1 A Física Mesoscópica e a Spintrônica

A Física da Matéria Condensada (FMC), também conhecida como Física do Estado Sólido, ocupa-se do estudo das propriedades físico-químicas de grandes agregados de átomos e moléculas em estado sólido, onde as interações são suficientemente fortes para manter a coesão e a forma de um material. Em geral, o arranjo de um grande número de átomos na matéria condensada dá-se através de uma estrutura periódica conhecida como rede cristalina, embora a FMC também se ocupe do estudo de materiais amorfos. O ramo mais consagrado e talvez mais antigo da FMC corresponde ao estudo de propriedades macroscópicas de sistemas físicos a partir de sua constituição microscópica, onde são consideradas as interações entre muitos átomos num regime conhecido como

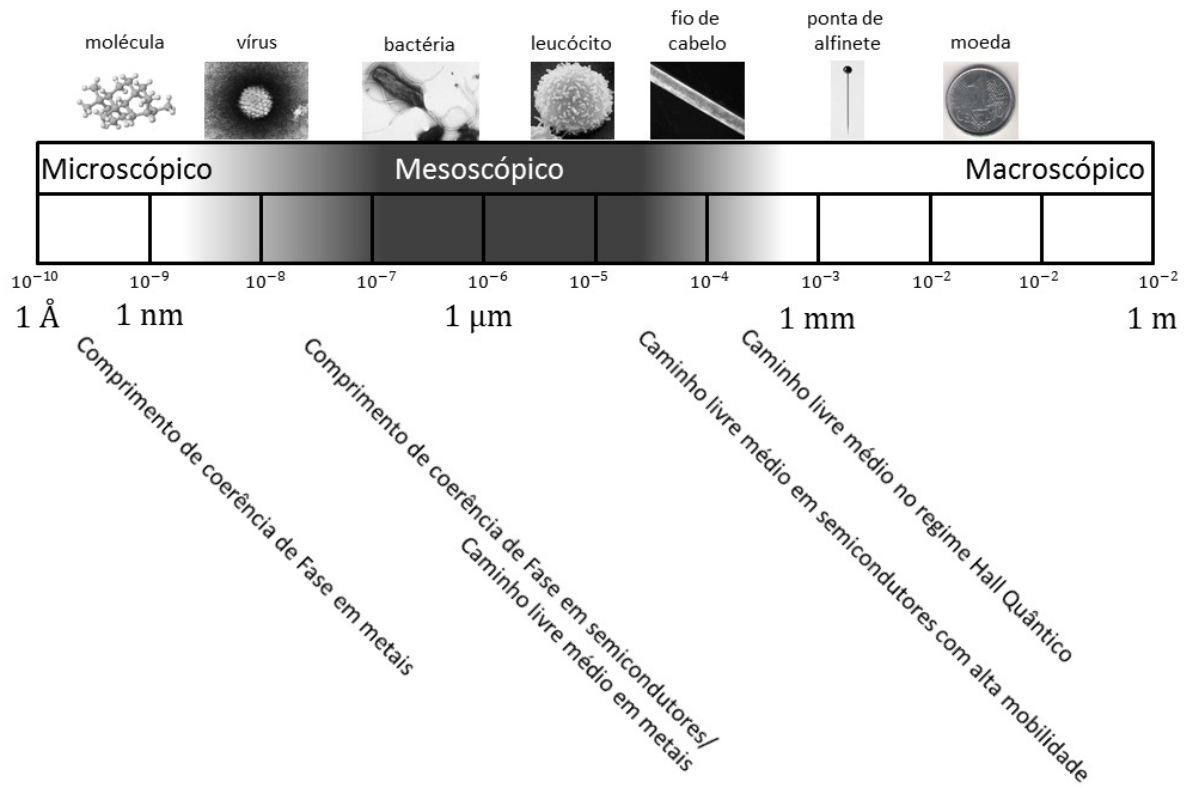
limite termodinâmico, em que o número de partículas do sistema (N) tende ao infinito, assim como o volume V , mas a densidade $\rho = N/V$ é uma constante. Os pilares fundamentais da FMC são os seguintes: as leis do eletromagnetismo, a mecânica quântica e a física estatística. Diferentemente do estudo de átomos isolados, onde os níveis de energia estão bem definidos, a FMC contempla bandas de energia (MADELUNG, 1978), onde os três ramos da física elementar se entrelaçam a todo momento.

De um modo geral, tem-se em um extremo a Física dos Átomos e Moléculas, onde os sistemas tem dimensões verdadeiramente microscópicas e a Física é completamente dominado pelas leis da Mecânica Quântica, enquanto no outro extremo os sistemas de muitos átomos e dimensões macroscópicas são descritos por leis da Física Clássica. Até o início da década de 1980, devido à impossibilidade de fabricação de dispositivos em uma escala pequena o suficiente, não era possível encontrar o limite onde as leis macroscópicas deixavam de funcionar e tinham que dar lugar a leis microscópicas.

A crescente miniaturização de dispositivos eletrônicos dentro dos circuitos integrados proporcionada pela Engenharia de Materiais e alavancada, sobretudo, pela indústria da informática, que busca aumentar a velocidade de processamento a capacidade de armazenamento de dados, levou ao surgimento de estruturas em escala de dimensões nanométricas, onde as regras da Física Macroscópica deixam de ser válidas e pode-se, sob o ponto de vista puramente científico, estudar como ocorre a transição entre o mundo microscópico e a escala de dimensões macroscópicas. Estruturas com dimensões muito maiores do que as atômicas, porém, pequenas o suficiente para fazer emergir fenômenos inerentemente quânticos e inviabilizar alguns tratamentos triviais que são utilizados em escalas maiores tem sido construídas. O ramo da FMC que se ocupa em estudar uma escala intermediária entre a microscópica e a macroscópica é denominada *Física Mesoscópica* (DATTA, 1995; IMRY, 1997). A Figura 1 ilustra a faixa de estudos da Física Mesoscópica, que se concentra no intervalo de algumas unidades de nanômetros até algumas centenas de micrometros.

O domínio de técnicas de nanofabricação, que permitem manipular átomos e construir estruturas em escala nanométrica, faz da procura por materiais especializados nanoestruturados o “Graal” de cientistas e engenheiros e que tornou possível o desenvolvimento da eletrônica e da informática como são hoje conhecidas. A fabricação de materiais magnéticos nanoestruturados em multicamadas, como é o caso de uma junção de tunelamento magnética, tema que será abordado neste trabalho, possibilitou o crescimento exponencial no armazenamento de informação em discos rígidos e em memórias de acesso

Figura 1: Escalas microscópica, mesoscópica e macroscópica .



A escala de comprimento (em metros) é comparada a dimensões conhecidas e também a comprimentos de coerência de fase e caminhos livres médios de diversos materiais.

Fonte: Adaptado de Datta (1995).

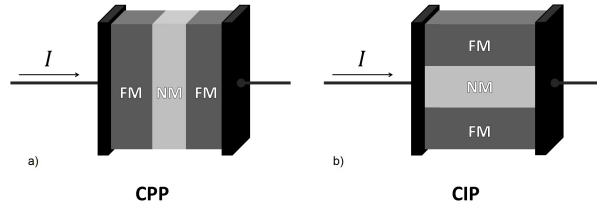
randômico (RAM), bem como em sensores de campo magnético. (CALLISTER, 2008).

A descoberta experimental da magnetorresistência gigante (GMR) de forma independente pelos grupos de pesquisa dos físicos Peter Grünberg e Albert Fert em 1988, alavancou uma série de novas tecnologias, com destaque para o armazenamento magnético de informação. Ela consiste na mudança significativa na resistência elétrica dependendo da direção de magnetização de diferentes camadas ferromagnéticas. As cabeças de leitura de discos rígidos empregam o efeito de GMR amplamente, o que permitiu a redução do tamanho desses dispositivos, permitindo a miniaturização e a compressão dos dados que podem ser gravados em cada unidade de área do disco magnético. Espera-se ainda um futuro promissor para as Memórias de Acesso Randômico Magnetorresistivas (MRAM), ainda em desenvolvimento, sendo consideradas peças-chave para novos equipamentos móveis de alto desempenho e baixo consumo energético.

O efeito de GMR está fortemente associado à polarização das bandas de energia

em relação ao spin do elétron que influencia o espalhamento do elétron de condução. Assim, conseqüentemente, tem-se que a orientação da magnetização das várias camadas magnéticas altera a resistência elétrica do sistema. A estrutura básica de uma MTJ consiste em três camadas, onde duas camadas ferromagnéticas são separadas por uma camada não magnética (em geral, com espessura de 1 nm), como mostra a Figura 2.

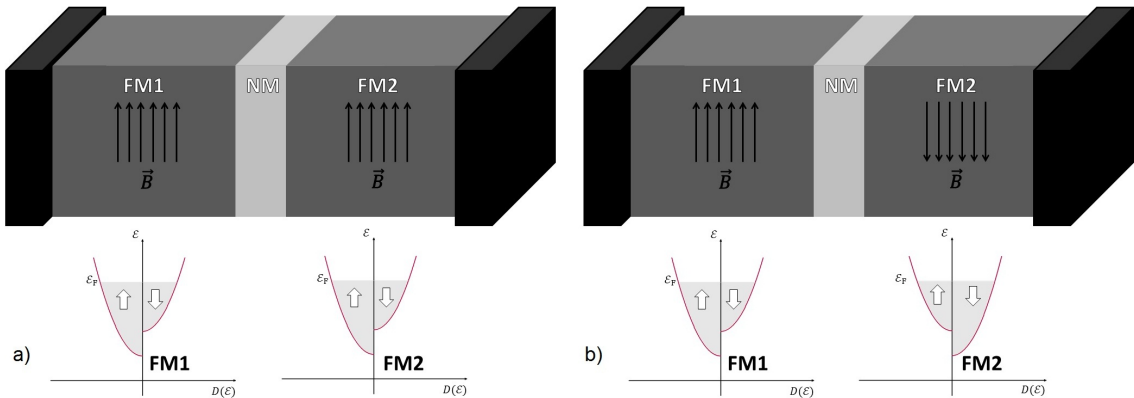
Figura 2: Configurações de Junções de Tunelamento Magnéticas.



Duas configurações possíveis das MTJs: (a) corrente perpendicular ao plano e (b) corrente paralela ao plano.

Observa-se que duas geometrias podem ser consideradas para medição: a corrente perpendicular ao plano das camadas (CPP, do inglês “*Current Perpendicular to the Plane*”) e a corrente no mesmo plano das camadas (CIP, do inglês “*Current In Plane*”). Um dos obstáculos encontrados na construção de uma MTJ (principalmente na configuração CPP) é a criação de isolantes finos e uniformes (PATTERSON, et al. 2007). A dificuldade se dá devido à construção de filmes extremamente finos, presentes nas duas configurações mas essenciais na configuração CPP por ser necessária a passagem da corrente através da camada isolante. Na Figura 3 estão representados os esquemas paralelo (Figura 3a) e o antiparalelo (Figura 3b), importantes para determinar as densidades de estado em cada lado da barreira.

Figura 3: Configurações de magnetização de uma MTJ.



Densidade de estados na configuração (a) paralela e (b) antiparalela.

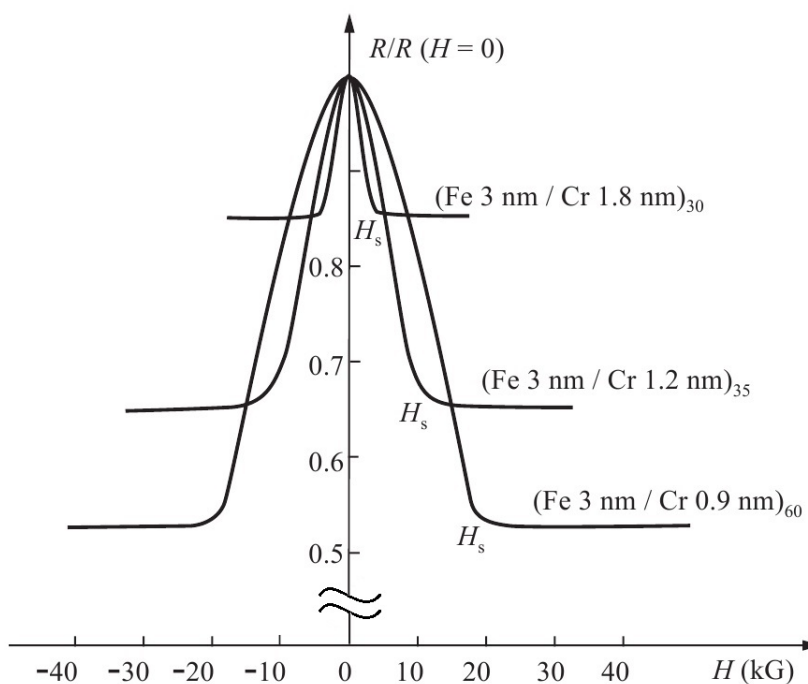
Algebricamente, a GMR é medida através da relação:

$$MR = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P}, \quad (1.1)$$

onde MR é a Magnetorresistência e R_P (R_{AP}) é a resistência na configuração paralela (antiparalela).

A Figura 4 foi retirada do trabalho de Baibich (1988) e mostra que a resistência de super-redes (*superlattices*) Fe/Cr com acoplamento antiferromagnético pode ser alterada significativamente quando o sistema é sujeito a campos magnéticos de diferentes intensidades (DUAN, et al. 2005). Tem-se que a espessura das sucessivas camadas é de 1 a 2 nm e a MR apresentada chega a valores superiores a 20%. Em um trabalho anterior, Grünberg, et al. (1989) estuda estruturas multicamadas Fe/Cr, onde a espessura das camadas fica na faixa de 20nm, e o efeito de MR fica reduzido para $\sim 1,5\%$, mostrando a importância do aspecto nanométrico e do comprimento de correlação de fase quântica para a observação do efeito de GMR.

Figura 4: Magnetorresistência de três super-redes Fe/Cr a 4,2 K.



Cada curva plotada no gráfico indica a variação da Resistência elétrica ($R/R(H=0)$) devido à mudança do campo magnético aplicado (H) em uma super-rede diferente. Estão indicados na figura a espessura de cada camada (em nm) e a quantidade de bicamadas Fe-Cr em cada amostra (subscrito).

Fonte: Baibich, 1988.

Uma das tecnologias emergentes mais promissoras, surgida na década de 1980,

é a Spintrônica - neologismo de Eletrônica baseada em transporte de Spin. Ela surgiu a partir de fenômenos de transporte em dispositivos de estado sólido estudados por Jullière (1975). O ponto de partida do estudo foi a análise de junções de tunelamento magnéticas. Em 2007, Peter Grünberg e Albert Fert receberam o prêmio Nobel em Física por seus trabalhos na área, fato que deu grande destaque para a Spintrônica, trazendo o assunto para discussão até mesmo entre leigos em ciência aplicada.

Os prognósticos na área de Física do Estado Sólido e Nanoeletrônica apontam na direção da Spintrônica e na manipulação de dados baseados nessa tecnologia. Os Transistores de Spin (*Spin Transistors*) são dispositivos em foco em trabalhos recentes nesta área, que possibilitariam uma agregação de novos dispositivos com os tradicionais (baseados em silício). Essa “compatibilidade” entre dispositivos possibilita a fácil inserção de dispositivos de origem nanomagnética na tecnologia atual, gerando um salto quantitativo e qualitativo em armazenamento de informação e velocidade de processamento. Vários tipos de transistores de spin foram propostos em publicações recentes, como o Transistor de efeito de campo de Spin, proposto por Datta e Das (1990); o transistor magnético bipolar, proposto por Zutic, et al. (2004); e o transistor de spin de elétrons quentes. Eles baseiam-se no transporte de corrente elétrica, abalizado no spin.

1.2 Spintrônica na Computação Quântica

Muito comentada atualmente, a Computação Quântica pode utilizar a Spintrônica como idealizadora de seus dispositivos. Os computadores atuais (denominados “clássicos”) são incapazes de, ou demoram demasiadamente para, desenvolver determinados tipos de cálculos quânticos, por serem constituídos de componentes clássicos. Além disso, segundo McMahan (2007), um computador quântico poderia ser incrivelmente mais rápido e poderia quebrar qualquer sistema de segurança de dados atuais rapidamente. O bit é a unidade fundamental de armazenamento de informação na computação clássica. A Computação Quântica, entretanto, é alicerçada em um conceito análogo: o bit quântico, conhecido como *qubit*. O qubit é um objeto matemático com propriedades bem específicas. Utilizando aqui a notação de Dirac (assim como na maior parte deste trabalho) pode-se separar dois estados possíveis para os qubits: $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Mas, diferentemente dos bits convencionais, os qubits podem adquirir qualquer combinação linear dos estados, a saber:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (1.2)$$

Onde α e β são números complexos e $|\psi\rangle$ é o estado geral do sistema em questão: um qubit, ou um vetor em um espaço vetorial bidimensional. Assim, podemos dizer que $|0\rangle$ e $|1\rangle$ formam uma base ortonormal para este espaço vetorial e que, devido à normalização:

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 = \langle\psi|\psi\rangle . \quad (1.3)$$

Geometricamente pode-se interpretar, a partir das definições acima, que o estado geral de um qubit é um vetor unitário em um espaço vetorial complexo bidimensional. Para ter uma ideia concreta de como um qubit pode ser concebido, é interessante listar algumas das formas esta concepção pode ocorrer:

- Como as duas polarizações diferentes de um fóton;
- Como dois estados de um elétron orbitando um átomo;
- Como o alinhamento de Spin em um campo magnético.

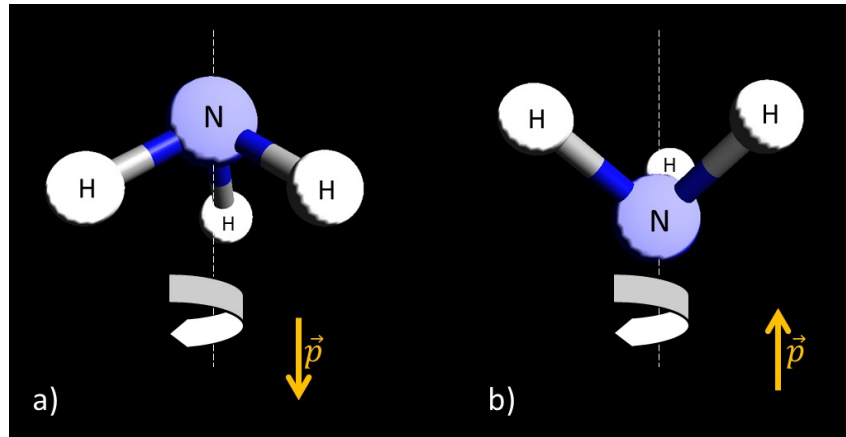
sendo que a última sentença consiste na premissa de vincular o estado $|0\rangle$ ao spin *up* e $|1\rangle$ ao spin *down* (NIELSEN, et al., 2000), realizando a conexão entre a Computação Quântica e a Spintrônica.

1.3 Histórico do MASER

Charles Townes, então trabalhando na Universidade de Columbia, utilizou o processo de emissão estimulada para construir um amplificador de microondas, batizando-o de MASER (Amplificador de Microondas por Emissão Estimulada de Radiação), produzindo um feixe coerente de microondas voltado para o uso em telecomunicações. Este primeiro MASER foi produzido com vapor de amônia (NH_3) em 1954. Os dois níveis de energia usados são estados vibracionais da molécula de amônia: como mostra a Figura 5. O átomo de hidrogênio oscila entre duas posições, acima e abaixo do plano dos átomos de hidrogênio.

A molécula de amônia possui muitos estados mas, no caso do MASER, considera-se que o sistema é de dois níveis somente. Um modelo físico pode ser visualizado na Figura 5. Considerando-se que os três átomos de hidrogênio rotacionam em torno de um eixo perpendicular ao plano formado por eles e o átomo de nitrogênio permanece neste eixo, existem duas condições possíveis: o nitrogênio pode estar em um lado do plano dos hidrogênio, ou no outro. Feixes formados por moléculas de amônia nesses estados

Figura 5: Átomos de amônia com diferentes níveis de energia.



Um modelo físico de dois estados de base para a molécula de amônia: (a) com energia em nível alto $|\uparrow\rangle$ e (b) com energia em nível baixo $|\downarrow\rangle$. Estes estados possuem momento de dipolo magnético \vec{p} associado à rotação da molécula

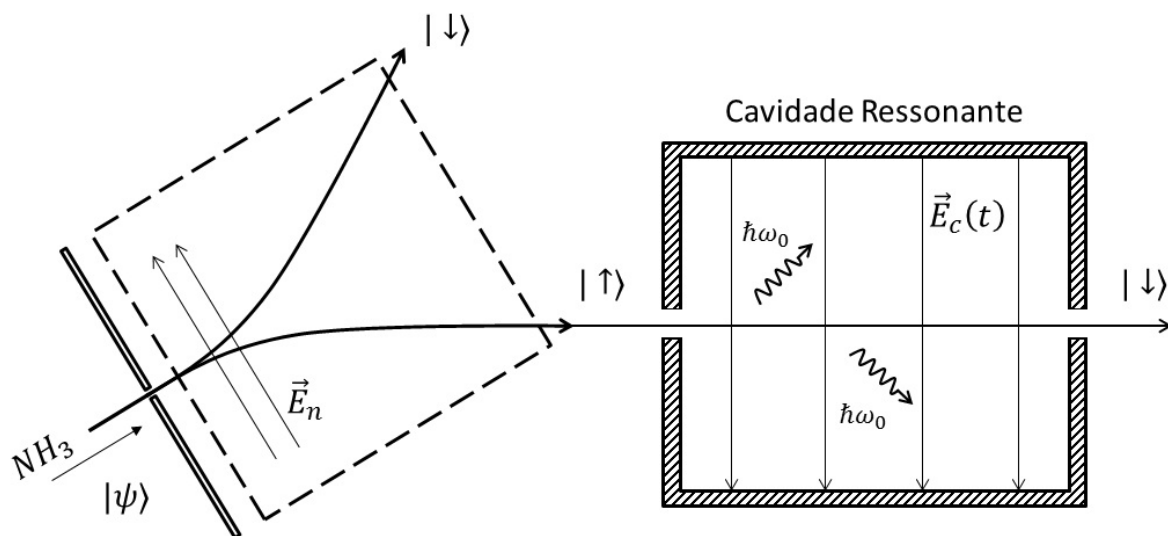
podem ser representados pelos vetores de estado $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$; e podem ser tomados como um conjunto de estados de base para estudo do comportamento do feixe de molécula de amônia (FEYNMAN, 1964).

A montagem geral do MASER de amônia é mostrada na Figura 6. Inicialmente, um feixe de amônia de estado geral $|\psi\rangle = C_{\uparrow}|\uparrow\rangle + C_{\downarrow}|\downarrow\rangle$ é separado em dois estados puros $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ através de um campo elétrico não uniforme. Então, as moléculas com estado de energia mais alta $|\uparrow\rangle$ passam através de uma cavidade com frequência de ressonância de 24 GHz. Ao passar pela cavidade, com um campo elétrico variante no tempo, as moléculas que possuíam estado excitado $|\uparrow\rangle$ emitem um fóton de energia $\hbar\omega_0$ e decaem no estado com menor energia $|\downarrow\rangle$.

Devido a seus trabalhos relativos a MASERs, Townes e Schawlow ganharam o prêmio Nobel em 1964 (SILFVAST, 2004). Outros tipos de MASERs foram propostos por uma série de autores em meados dos anos 80 (FILIPOWICZ, et al. 1986; HESS, 1986; ENSLEY, 1989; LUGIATO, et al. 1987), porém, maior parte deles exige muito espaço para execução por ser baseado em gás.

Com o advento da Spintrônica, foi possível conceber um MASER baseado nessa tecnologia: o presente trabalho procura desenvolver um MASER de estado sólido baseado na emissão de fótons causada por inversão de Spin. Para tal, propõe a inserção de uma junção de tunelamento magnética dentro de uma cavidade ressonante de dimensões calculadas a partir de uma série de condições de contorno. A injeção de elétrons através das várias camadas da MTJ pode causar inversão de Spin dentro da cavidade, causando

Figura 6: Diagrama de montagem do MASER de amônia.



Estão indicados na figura o feixe de amônia (NH_3) inicialmente em um estado geral $|\psi\rangle$ separado em feixes com estados de menor energia $|\downarrow\rangle$ e de maior energia $|\uparrow\rangle$ devido a um campo elétrico não uniforme \vec{E}_n . Um feixe com estado $|\uparrow\rangle$ emite fótons com energia $\hbar\omega_0$ ao passar por uma cavidade ressonante com um campo elétrico variante no tempo $\vec{E}_c(t)$. O estado final do feixe é de baixa energia $|\downarrow\rangle$

Adaptado de Feynman (1964).

a emissão de um fóton.

1.4 Justificativa e Objetivos

Os MASERs de estado gasoso são bastante grandes e alguns deles operam em baixas temperaturas, o que requer uma estrutura complexa e de dimensões físicas grandes, compatíveis apenas com utilização em laboratório ou para grandes aplicações militares e industriais. Pode-se considerar também o exemplo dos LASERs, cujo princípio físico de operação é o mesmo de um MASER, porém operando no espectro de frequências ópticas. Lasers gasosos, embora possuam uma grande pureza espectral de emissão, ocupam bastante espaço e utilizam uma quantidade considerável de energia, sendo utilizados então em situações que requerem alta potência de saída. Por outro lado, LASERs de estado sólido, concebidos usualmente através de estruturas semicondutoras, como é o caso do diodo LASER, tem tamanho reduzido, necessitam de baixas potências de alimentação e permitiram aplicações de outra forma inviáveis, como o caso dos leitores e gravadores de CD, DVD e Blu-ray, além dos apontadores utilizados frequentemente em apresentações. Decorrente dos motivos citados, justifica-se a busca por uma estrutura de estado sólido de

dimensões reduzidas que permitam a emissão estimulada de microondas, ou seja, obtenção da ação MASER para uso em circuitos de microondas, na manipulação de correntes de spin através do uso de RF, amplificadores de estado sólido de alta coerência e pureza espectral, além de outras possibilidades como por exemplo, osciladores de aparelhos de telefonia celular.

As junções de tunelamento magnéticas permitem a injeção de uma corrente polarizada em spin e parecem, portanto, estruturas promissoras para alcançar um efeito de emissão estimulada e altamente coerente de microondas.

São objetivos deste trabalho:

- estudar e compreender o funcionamento de uma junção de tunelamento magnética através de um Hamiltoniano de transferência escrito na linguagem de segunda quantização;
- propor um mecanismo de *spin-flip* através de interação com o campo de fótons de uma cavidade de microondas;
- propor equações de taxa fenomenológicas para a emissão de fótons;
- obter valores aproximados para grandezas físicas relevantes, como a corrente de limiar para que ocorra ação MASER e;
- mostrar se é possível obtenção do efeito MASER através da inserção de uma junção de tunelamento magnética no interior de uma cavidade ressonante apropriadamente projetada.

1.5 Estrutura da dissertação

Esta dissertação é constituída de cinco capítulos. Como pôde-se observar, no Capítulo 1 foram realizadas considerações gerais do tema, inserindo-o no atual contexto de pesquisa na área de Física da Matéria Condensada.

No Capítulo 2 serão apresentados conceitos básicos de segunda quantização e de como bósons e férmions se comportam sujeitos ao procedimentos de segunda quantização. Logo após, o Hamiltoniano de Transferência, a Regra de Ouro de Fermi a Distribuição de Fermi-Dirac e a Corrente de Spin são definidos e, em seguida, aplicados ao tunelamento com conservação de Spin, essencial em nossa junção de tunelamento.

No Capítulo 3 serão mostrados os fundamentos da teoria de MASERs, que incluem os vários elementos que o compõem (o meio ativo, a fonte e o ressonador). A Cavidade Ressonante (utilizada na geração do efeito MASER como ressonador) é definida e alguns parâmetros que a dimensionam são equacionados. São desenvolvidas equações de taxa aplicadas a uma situação geral como base para, posteriormente, escrever as equações de taxa específicas das condições deste trabalho.

Em seguida, Capítulo 4 as correntes de Spin encontradas no Capítulo 2 serão aplicadas a equações de taxa desenvolvidas para levar em conta efeitos diversos da cavidade ressonante e da MTJ. Na sequência, alguns materiais de fabricação dos componentes serão discutidos e será feita uma proposta de dimensionamento da cavidade ressonante e da MTJ.

Por fim, no Capítulo 5 será realizada a conclusão do trabalho, com uma discussão a respeito da possibilidade do uso de um fluido ferromagnético para geração do Efeito MASER.

2 Fundamentação Teórica

A Mecânica Quântica é a teoria física mais bem sucedida na ciência contemporânea e trata de sistemas físicos de pequenas dimensões onde a ordem de grandeza da ação é $\hbar = 1,054 \times 10^{-34}$ J·s, permitindo descrever o comportamento de átomos, moléculas, elétrons, e outras partículas subatômicas. Ela afirma, por exemplo, que o estado de um sistema com função de onda ψ pode ser representado por um vetor em um espaço de Hilbert, conhecido como *ket* $|\psi\rangle$ (que possui um correspondente dual: o *bra* $\langle\psi|$) (COHEN-TANNOUJJI, et al., 1977). O Espaço de Hilbert é um espaço vetorial linear complexo normado, ou seja, cada estado físico é um vetor com componentes complexas de tal forma que o produto interno tem norma definida, podendo ser seu valor normalizado $(\psi^*, \psi) = \langle\psi|\psi\rangle = 1$ dando caráter probabilístico à teoria, conforme Max Born (GRIFFITHS, 1995; SAKURAI, 1994). A notação de *bras* e *kets* foi desenvolvida por Paul Dirac e é uma forma elegante e eficiente de trabalhar com operações matriciais que surgem frequentemente na Mecânica Quântica. Para aplicações em Física da Matéria Condensada faz-se necessário aplicar as leis da Mecânica Quântica a sistemas de muitas partículas e o formalismo matemático da chamada Segunda Quantização é uma ferramenta extremamente útil nesses casos. Os conceitos essenciais para o entendimento dessa ferramenta serão desenvolvidos ao longo deste capítulo e, em seguida, aplicado em situações pertinentes.

2.1 Formulações Lagrangiana e Hamiltoniana

Muito populares na Mecânica Clássica e na Mecânica Quântica, as formulações Lagrangiana e Hamiltoniana são utilizadas como formas alternativas de resolver certos tipos de problemas muito complicados, ou mesmo inviáveis, na formulação clássica. Além disso, elas podem viabilizar perspectivas mais amplas tanto na estrutura geral da Mecânica Clássica quanto em sua conexão com a Mecânica Quântica. Estas formulações são extremamente úteis pois possibilitam tratar de problemas utilizando as energias

de um sistema (variáveis essencialmente escalares) em vez de variáveis vetoriais, que tornam os cálculos muito mais trabalhosos ou, até mesmo, impossíveis de serem realizados (MARION, THORNTON, 2004; ALMEIDA, 1988; CALKING, 1996).

2.1.1 O Princípio da Mínima Ação

A formulação mais geral das leis que governam o movimento em sistemas mecânicos é conhecida como Princípio da Mínima Ação ou Princípio de Hamilton. Este princípio diz que todo sistema mecânico (ou outro sistema que possua parâmetros equivalentes) é caracterizado por uma função dependente de uma coordenada generalizada e sua velocidade, bem como do tempo ($\mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$) conhecida como Lagrangiano (LANDAU, LIFSHITZ, 1981).

Seja um sistema que ocupa, nos instantes t_1 e t_2 , posições definidas por dois conjuntos de valores das coordenadas, respectivamente $q^{(1)}$ e $q^{(2)}$. A integral

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt \quad (2.1)$$

é definida como *ação* do sistema e deve ter o menor valor possível (mínimo). O fato do Lagrangiano conter derivadas não maiores que q e \dot{q} demonstra que um sistema mecânico é definido totalmente quando suas coordenadas e velocidades são dadas.

Por simplicidade, considera-se por enquanto um sistema com somente um grau de liberdade e, por consequência, apenas a função $q(t)$ a ser determinada. Considera-se $q = q(t)$ a função para qual S é mínimo. Assim, S aumenta quando $q(t)$ é substituída por qualquer função da forma

$$q(t) + \delta q(t) , \quad (2.2)$$

onde $\delta q(t)$ é uma função pequena no intervalo entre t_1 e t_2 e é chamada de variação da função $q(t)$. Uma vez que em $q^{(1)}$, $t = t_1$ e em $q^{(2)}$, $t = t_2$; resulta que

$$\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0 . \quad (2.3)$$

A ação, portanto, fica

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) dt - \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt . \quad (2.4)$$

Quando esta diferença é expandida em potências de δq e $\delta \dot{q}$ no integrando, os termos principais são de primeira ordem. A condição necessária para S ter um mínimo é a de que esses termos devem ser zero. Desta forma, o princípio de mínima ação pode ser escrito

na forma

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt = 0 , \quad (2.5)$$

ou, ainda

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \delta q + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right) dt = 0 . \quad (2.6)$$

Uma vez que $\delta \dot{q} = d\delta q/dt$, integra-se o segundo termo por partes

$$\delta S = \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) \delta q dt = 0 . \quad (2.7)$$

As condições (2.3) mostram que o termo integrado em (2.7) é zero. Desta forma, resta uma integral que zera para todos os valores de δq (se seu integrando também for zero).

Assim, tem-se

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = 0 . \quad (2.8)$$

Para sistemas com n graus de liberdade, cada função $q_i(t)$ deve variar de forma independente, portanto

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (2.9)$$

esta equação diferencial é conhecida como *Equação de Lagrange*. Se o Lagrangiano de um dado sistema é conhecido, as equações (2.9) revelam as relações entre acelerações, velocidades e coordenadas, em outras palavras, as equações de movimento do sistema.

De forma geral, o Lagrangiano de um sistema é definido como

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = K(\dot{q}, t) - U(q) , \quad (2.10)$$

onde K é a energia cinética e U é a energia potencial.

2.1.2 Equações de Hamilton

A formulação das leis da mecânica em termos do Lagrangiano, bem como as equações de Lagrange derivadas, pressupõe que o estado mecânico do sistema é descrito especificando suas coordenadas e velocidades generalizadas. Todavia, este não é o único modo de descrição. No estudo de certos problemas gerais da mecânica é mais vantajoso recorrer à descrição em termos das coordenadas e momentos generalizados do sistema (LANDAU, LIFSHITZ, 1981).

A passagem de um conjunto de variáveis independentes para outro pode ser

efetuada por meio da Transformação de Legendre, a ser vista a seguir. O diferencial total do Lagrangiano como função de coordenadas e velocidades é

$$d\mathcal{L} = \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i . \quad (2.11)$$

Uma vez que as derivadas $\partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}_i$ são, por definição, os momentos generalizados e, segundo as equações de Lagrange $\partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}_i = \dot{p}_i$, (2.11) pode ser escrita como

$$d\mathcal{L} = \sum \dot{p}_i dq_i + \sum p_i d\dot{q}_i . \quad (2.12)$$

O segundo termo de (2.12) pode ser escrito como

$$\sum p_i d\dot{q}_i = d\left(\sum p_i \dot{q}_i\right) - \sum \dot{q}_i dp_i , \quad (2.13)$$

ou ainda,

$$d\left(\sum p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}\right) = -\sum \dot{p}_i dq_i + \sum \dot{q}_i dp_i . \quad (2.14)$$

O argumento do diferencial, que é a energia do sistema expressada em termos de coordenadas e momentos generalizados, é conhecido como o *Hamiltoniano* do sistema:

$$H(p, q, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} . \quad (2.15)$$

Da equação diferencial

$$dH = -\sum \dot{p}_i dq_i + \sum \dot{q}_i dp_i , \quad (2.16)$$

na qual as variáveis independentes são as coordenadas e momentos, tem-se as equações

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} , \quad (2.17)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} . \quad (2.18)$$

Elas são chamadas de *Equações de Hamilton*.

O Hamiltoniano de um sistema qualquer pode ser calculado como a soma de todas as energias deste sistema. Um corpo com energia cinética K sujeito a um potencial U possui Hamiltoniano

$$H(p, q) = K(p) + U(q) . \quad (2.19)$$

Aplicando-o às equações de Hamilton (2.17) e (2.18), pode-se encontrar as equações de movimento do sistema.

No Apêndice A as formulações Lagrangiana e Hamiltoniana são aplicadas a um circuito LC, demonstrando sua versatilidade e esclarecendo algumas técnicas de aplicação.

2.2 Indistinguibilidade e simetria

Na Mecânica Clássica é sempre possível acompanhar a trajetória das partículas de modo independente, de tal modo que seria possível rotular cada partícula individualmente, o que as torna distinguíveis. Por exemplo, duas bolas de bilhar clássicas podem ter sua trajetória completamente conhecidas pois podem ser identificadas pela sua cor e/ou número. Por isso diz-se que as partículas clássicas são distinguíveis. O mesmo não ocorre na Mecânica Quântica, onde dois ou mais elétrons interagindo não podem ser mais rotulados de forma inequívoca, e a incerteza inerentemente quântica os torna indistinguíveis em certas circunstâncias. A indistinguibilidade das partículas elementares na Mecânica Quântica conduz a importantes conclusões sobre a descrição de seus movimentos. Isto ocorre porque é impossível formular uma descrição de movimento que inclui a indistinguibilidade logo no começo. Como consequência, pode-se descrever um estado de N partículas como um estado $|\psi_{1,\dots,i,\dots,j,\dots,N}\rangle$ que assume uma possível distinção entre as partículas, indicada pela ordem dos índices na notação $1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N$. Contudo a indistinguibilidade das partículas elementares implica que a troca entre duas partículas quaisquer deve descrever o mesmo sistema físico.

Tem-se que dois estados quânticos possuem as mesmas propriedades físicas mesmo se eles diferem por um fator de fase ($\exp[i\alpha]$). Assim, a indistinguibilidade exige que

$$|\psi_{1,\dots,i,\dots,j,\dots,n}\rangle = \exp[i\alpha]|\psi_{1,\dots,j,\dots,i,\dots,n}\rangle, \quad (2.20)$$

pela permuta dos índices das partículas i, j , sendo α um ângulo desconhecido. Aplicando esta expressão duas vezes, trocando o mesmo par de índices (i, j) novamente, pode-se concluir que

$$|\psi_{1,\dots,i,\dots,j,\dots,n}\rangle = \pm|\psi_{1,\dots,j,\dots,i,\dots,n}\rangle; \quad (2.21)$$

em outras palavras, uma função de onda pode ser *simétrica* ou *antissimétrica*, de acordo com os sinais $+$ ou $-$ que aparecem acima, devido à permuta de índices. A teoria quântica prevê, portanto, que partículas são indistinguíveis de duas maneiras distintas. Partículas que possuem funções de onda simétricas são chamadas de *bósons* e as que possuem funções de onda antissimétricas são chamadas de *férmions* (SCHILLER, 2006). Na Tabela 1 estão colocadas as principais diferenças entre estes dois tipos de partículas.

Tabela 1: Diferenças principais entre Bósons e Férmions

Característica	Bósons	Férmions
Função de onda	simétrica	antissimétrica
Spin	inteiro ($0, \pm 1, \pm 2, \dots$)	semi-inteiro ($\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots$)
Estatística regente	Bose-Einstein	Fermi-Dirac
Princípio de exclusão de Pauli	não obedece	obedece
Exemplos	fótons, mágnons, fônons	elétrons, prótons, nêutrons

Diversas propriedades listadas na Tabela 1 serão exploradas e discutidas ao longo do trabalho.

2.3 Segunda quantização e Operadores

A Mecânica Clássica lida com dois conceitos bastante distintos e fundamentais para a compreensão da natureza. O primeiro deles é o conceito de partícula, que é bem localizada no espaço e descrita por trajetória bem definida no chamado espaço de fase, tendo o tempo como parâmetro independente. No outro extremo tem-se o conceito de campos clássicos, cujos valores de amplitude, polarização, densidade de energia e momento, dentre outros, aparecem como os graus de liberdade e as coordenadas espaço-temporais. Tais parâmetros utilizados para descrever o campo, que tem existência em todo o espaço.

A primeira versão da Mecânica Quântica permite descrever a física das partículas através de uma função de ondas de caráter probabilístico, da qual se calculam os valores médios das grandezas físicas observáveis. Essa versão corresponde à quantização de grandezas associadas a partículas, como energia, momento, momento angular e spin. Essas grandezas físicas observáveis passam a ser representadas por operadores matriciais, cujos valores possíveis correspondem aos autovalores associados. Em outras palavras, a primeira quantização é a quantização da teoria das partículas elementares.

Por sua vez, a Teoria Quântica de Campos é uma extensão da teoria clássica dos campos, onde os observáveis clássicos associados aos campos físicos, como energia e momento, são quantizados. O campo eletromagnético, por exemplo, adquire o status de um operador matricial. Esse processo, também denominado *Segunda Quantização*, permite trabalhar os sistemas de muitos corpos representando as partículas por um campo quântico cuja excitação, ou quantum, aparece como partícula. Isso se deve à famosa dualidade onda-partícula. Nesse caso a própria função de ondas ψ que descreve uma

partícula na primeira versão da Mecânica Quântica, deve assumir o status de operador. A equação de Schrödinger não-relativística, na primeira versão da Mecânica Quântica, escrita na forma abaixo,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}, t) \psi \quad (2.22)$$

é tomada como uma equação clássica, que descreve o movimento de algum tipo de fluido (SCHIFF, 1968). Aqui a densidade de probabilidade pode ser encontrada a partir de $|\psi|^2$, sendo ψ uma função complexa. Uma vez que a matéria condensada envolve muitos corpos, deve-se elevar o status da função ψ para um operador $\hat{\psi}$ cujos autoestados correspondentes sejam as funções ψ , ou seja:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}, t)|\psi\rangle, \quad (2.23)$$

de forma que $\psi(\mathbf{r}, t)$ satisfaça a equação de Schrödinger (2.22). Esse tipo de formalismo é caracterizado pelos operadores de campo $\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)$ e seu conjugado hermitiano $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ que satisfazem regras de comutação bem definidas. Considera-se que o sistema físico tenha um “estado” de vácuo $|0\rangle$, caracterizado pela ausência de qualquer partícula, de tal forma que a ação de $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ seja dada por:

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)|0\rangle = |\mathbf{r}, t\rangle, \quad (2.24)$$

significando que uma partícula é criada pelo operador $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ na posição \mathbf{r} no instante de tempo t .

Podem ser definidos também, utilizando esses mesmos operadores, um operador número \hat{N} e um operador Hamiltoniano \hat{H} , que fornece uma representação adequada para um sistema composto por um número de partículas e uma quantidade de energia finitas (PATHRIA, 1996).

A Segunda Quantização é um formalismo matemático utilizado para trabalhar problemas de muitos corpos, frequentemente encontrados na teoria do estado sólido. Ela permite lidar com “Partículas” como elétrons, fótons, ou até mesmo quanta de vibrações de um retículo cristalino rígido (fônon) e de excitações de spin (mágnons), com propriedades de simetria diferenciadas. Partindo da densidade Lagrangiana

$$\mathcal{L}(\psi, \nabla \psi, \dot{\psi}) = i\hbar \hat{\psi}^\dagger \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\psi}^\dagger \cdot \nabla \hat{\psi} - V(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \quad (2.25)$$

e aplicando a equação de Schrödinger, pode-se calcular o momento canonicamente conjugado de ψ , sendo

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar \hat{\psi}^\dagger. \quad (2.26)$$

A partir dele, podem ser encontradas as relações de comutação que serão utilizadas no próximo capítulo para definir regras de comutação de bósons e férmions (GREINER, et al. 1996; SCHIFF, 1968).

Na segunda quantização a função de ondas $\psi(\mathbf{r})$ é transformada no operador $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ que é uma superposição linear de operadores de criação e/ou aniquilação na forma

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n \phi_n(\mathbf{r}, t) , \quad (2.27)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n^\dagger \phi_n^\dagger(\mathbf{r}, t) , \quad (2.28)$$

onde a_n é o operador de aniquilação de partícula e a_n^\dagger é o operador de criação de partícula, que satisfazem regras de comutação bem definidas (diferenciada para férmions e bósons). Observa-se que, assim como a função de onda se transforma em um operador $\hat{\psi}$, o coeficiente de cada função de onda ϕ_n se torna um operador a_n . O índice n corresponde a um conjunto de números quânticos do n -ésimo estado quântico do sistema, podendo ser, por exemplo, $n = \mathbf{k}\sigma$, sendo \mathbf{k} o vetor de onda e σ o spin:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} \phi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}, t) , \quad (2.29)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \phi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\mathbf{r}, t) , \quad (2.30)$$

útil na abordagem deste trabalho, que levará em conta o transporte dependente do spin. Ambos os operadores $\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)$ e $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ operam sobre o espaço de Hilbert, implicando que um vetor neste espaço corresponde a um estado particular de um campo quantizado.

É possível ainda, a partir dos operadores de criação e aniquilação, definir o *operador número de partículas*

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i = \sum_i a_i^\dagger a_i , \quad (2.31)$$

onde \hat{n}_i é o operador número de partículas no i -ésimo estado. Ele possui a propriedade de resultar no número de partículas quando age sobre um estado qualquer.

2.3.1 Bósons e férmions

Pode-se utilizar uma representação de número de partículas denominado espaço de Fock e trabalhar nesse espaço. Com ele é possível construir estados quânticos de um número variável ou desconhecido de partículas a partir de um único espaço de Hilbert.

O espaço de Fock é a união de todos os espaços de Hilbert \mathcal{H}_N em um sistema de N partículas idênticas não relativísticas. Assim, o sub-espaço com $N = 0$ consiste somente no estado de vácuo e N é o autovalor de um operador número \hat{N} , que comuta com o hamiltoniano \hat{H} , isto é, $[\hat{N}, \hat{H}] = \hat{N}\hat{H} - \hat{H}\hat{N} = 0$ (HUANG, 2010). Como já comentado na Seção 2.2, os bósons e os férmions são partículas distintas, com propriedades específicas. Dentro da formulação da segunda quantização eles possuem diferenças marcantes, a serem desenvolvidas nesta Seção.

Para bósons definem-se os operadores de criação e aniquilação, respectivamente b_i^\dagger e b_i , que satisfazem a seguinte relação de comutação:

$$[b_i, b_j] = b_i b_j - b_j b_i = 0 \quad (2.32)$$

$$[b_i^\dagger, b_j^\dagger] = b_i^\dagger b_j^\dagger - b_j^\dagger b_i^\dagger = 0 \quad (2.33)$$

$$[b_i, b_j^\dagger] = b_i b_j^\dagger - b_j^\dagger b_i = \delta_{ij} \quad (2.34)$$

onde $\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$ e $\delta_{ij} = 1$ se $i = j$ (δ_{ij} é a função delta de Kronecker). Isso significa que a ordem criação de bósons em estados quânticos diferentes pode ser invertida.

A partir do comutador e das definições presentes nas equações 2.29 e 2.30, é possível encontrar a função de ondas na forma:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} b_{\mathbf{k}\sigma} \phi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}, t), \quad (2.35)$$

onde $b_{\mathbf{k}\sigma}$ é o operador de aniquilação de bósons com vetor de onda \mathbf{k} e spin σ ; relação válida para bósons que possuem carga elétrica não-nula que têm $\hat{\psi} \neq \hat{\psi}^\dagger$. Para bósons não-carregados a relação $\hat{\psi} = \hat{\psi}^\dagger$ deve ser satisfeita e nesse caso basta fazer:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} [b_{\mathbf{k}\sigma} \phi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}, t) + b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \phi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\mathbf{r}, t)], \quad (2.36)$$

onde as funções de ondas $\phi_{\mathbf{k}\sigma}$ são assumidamente conhecidas e formam uma base completa.

O operador de número de bósons com vetor de onda \mathbf{k} e spin σ é dado por:

$$\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} = b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.37)$$

enquanto que o número total é dado por

$$\hat{N} = \int d^3\mathbf{r} \psi^\dagger \psi = \sum_{\mathbf{k}\sigma} b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (2.38)$$

Assim, aplicando os operadores a um estado geral $|n_{\mathbf{k}\sigma}\rangle$ tem-se:

$$b_{\mathbf{k}\sigma}|n_{\mathbf{k}\sigma}\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}\sigma}}|n_{\mathbf{k}\sigma} - 1\rangle, \quad (2.39)$$

$$b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger|n_{\mathbf{k}\sigma}\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}\sigma} + 1}|n_{\mathbf{k}\sigma} + 1\rangle, \quad (2.40)$$

representando, respectivamente, a aniquilação e a criação de um bóson com vetor de onda \mathbf{k} e spin σ e

$$\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}|n_{\mathbf{k}\sigma}\rangle = n_{\mathbf{k}\sigma}|n_{\mathbf{k}\sigma}\rangle \quad (2.41)$$

mostra o operador número $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$ agindo sobre um estado $|n_{\mathbf{k}\sigma}\rangle$ resultando no número de bósons $n_{\mathbf{k}\sigma}$ no próprio estado.

A partir do formalismo descrito, pode-se quantizar um campo e desenvolver uma partícula (ou quase-partícula) que possui as características de um bóson. Como exemplo, tem-se o campo eletromagnético que, quando submetido às regras de segunda quantização, passa a ser considerado fóton. O mesmo vale para os fônons, que derivam da quantização das ondas de vibração em um meio elástico, e para os mágnons, que têm origem nas ondas de excitação de spin em uma rede cristalina (HAUG, et al. 2004; MATTIS, 2006).

Para férmions definem-se operadores os de criação e aniquilação c_i^\dagger e c_i que satisfazem a seguinte relação de anticomutação:

$$\{c_i, c_j\} = c_i c_j + c_j c_i = 0 \quad (2.42)$$

$$\{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = c_i^\dagger c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i^\dagger = 0 \quad (2.43)$$

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = c_i c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i = \delta_{ij} \quad (2.44)$$

onde δ_{ij} é a função delta de Kronecker. Para os férmions, a relação de anticomutação garante que somente uma partícula pode ocupar um dado estado quântico. Essas relações são consequência de algumas diferenças citadas na tabela 1.

A função de ondas pode ser expandida na forma:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \phi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}, t), \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \phi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\mathbf{r}, t), \quad (2.45)$$

se os bósons tem carga elétrica, sendo que nesse caso $\hat{\psi} \neq \hat{\psi}^\dagger$. Para bósons não-carregados a relação $\hat{\psi} = \hat{\psi}^\dagger$ deve ser satisfeita e nesse caso basta fazer:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \phi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}, t), \quad (2.46)$$

onde as funções de ondas $\phi_{\mathbf{k}\sigma}$ são assumidas conhecidas e formam uma base completa.

O operador de número de férmions com vetor de onda \mathbf{k} e spin σ é dado por:

$$\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} = c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} , \quad (2.47)$$

enquanto que o número total é dado por

$$\hat{N} = \int d^3\mathbf{r} \psi^\dagger \psi = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} . \quad (2.48)$$

A exemplo do que ocorre com os bósons, os férmions podem ser considerados resultados de quantizações de campos. O elétron pode ser encontrado a partir da quantização da própria equação de Schrödinger, originando o termo “Segunda Quantização” (HAUG, et al. 2004). Outro detalhe importante a respeito dos férmions é que eles obedecem o princípio de exclusão de Pauli, assim:

$$c^\dagger|0\rangle = |1\rangle , \quad (2.49)$$

$$c|1\rangle = |0\rangle , \quad (2.50)$$

$$c^\dagger|1\rangle = \vec{0} . \quad (2.51)$$

Desta forma, dois férmions idênticos não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente ou, de forma mais rigorosa, a função de onda de um sistema composto por dois férmions deve ser antissimétrica. Os kets de estado possíveis podem ser representados na forma de matriz, de modo que $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$; $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ e $\vec{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

2.3.2 Procedimento padrão de segunda quantização

O procedimento de segunda quantização é utilizado para transformar as funções de ondas em operadores que descrevem um campo quântico cujo quantum é a partícula (ou quase-partícula) que está sendo descrita por aquele campo. Como resultado, obtém-se uma formulação de mecânica quântica em termos de operadores de criação e aniquilação, adequados a descrever sistemas de muitos corpos.

Conhecido o hamiltoniano de uma partícula $\hat{H}_1(\mathbf{r}) = \mathbf{p}^2/(2m) + \hat{V}_1(\mathbf{r})$ tem-se

$$\hat{H} = \int d^3\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \hat{H}_1 \psi(\mathbf{r}) , \quad (2.52)$$

enquanto para interação de pares $\hat{H}_2 = \hat{V}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ a prescrição de segunda quantização diz

que:

$$\hat{H} = \int d^3\mathbf{r}\psi^\dagger(\mathbf{r})\hat{H}_1\psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}'\psi^\dagger(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}')\hat{V}_2(\mathbf{r},\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) , \quad (2.53)$$

sendo que os operadores $\hat{\psi}$ e $\hat{\psi}^\dagger$ devem obedecer ao chamado ordenamento normal, ou seja, os operadores $\hat{\psi}^\dagger$ devem aparecer sempre à esquerda dos operadores $\hat{\psi}$. Generalizando:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3\mathbf{r}\psi^\dagger(\mathbf{r})\hat{H}_1\psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2!} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}'\psi^\dagger(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}')\hat{V}_2(\mathbf{r},\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{3!} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \int d^3\mathbf{r}''\psi^\dagger(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}')\psi^\dagger(\mathbf{r}'')\hat{V}_3(\mathbf{r},\mathbf{r}',\mathbf{r}'')\psi(\mathbf{r}'')\psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) , +\dots \end{aligned} \quad (2.54)$$

onde \hat{V}_n é o potencial de interação entre n partículas simultaneamente. Geralmente considera-se que os termos dominantes correspondem à interação de uma partícula com um potencial conhecido gerado por outro tipo de partícula, $n = 1$ ou então à interação entre pares de partículas, $n = 2$.

Pode-se encontrar ainda, utilizando a segunda quantização, o Hamiltoniano de um sistema de muitas partículas não perturbado. Partindo-se, então, do já conhecido hamiltoniano de uma partícula livre em termos do operador momento (que trata-se da energia cinética mais um termo da magnetização do meio):

$$\hat{H}_{\text{pl}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \Delta_\alpha\sigma_z \quad (2.55)$$

onde Δ_α corresponde à uma energia de interação que depende da magnetização em materiais ferromagnéticos e do spin do elétron de condução, sendo σ_z o operador de projeção de spin ao longo do eixo z . A densidade Hamiltoniana $\hat{\mathcal{H}}$ é obtida facilmente através da seguinte expressão:

$$\hat{\mathcal{H}} = \psi^\dagger\hat{H}_{\text{pl}}\psi = \psi^\dagger\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi - \psi^\dagger\Delta_\alpha\sigma_z\psi = \frac{1}{2m}(\psi^\dagger\mathbf{p}) \cdot (\mathbf{p}\psi) - \Delta_\alpha\psi^\dagger\sigma_z\psi \quad (2.56)$$

e substituindo o operador momento \mathbf{p} por $-i\hbar\nabla$ pode-se obter:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^\dagger \cdot \nabla\psi - \Delta_\alpha\psi^\dagger\sigma_z\psi . \quad (2.57)$$

Em materiais ferromagnéticos, a magnetização é essencialmente causada por elétrons da banda d formada pela superposição de orbitais atômicos do tipo d (ou ainda por orbitais do tipo f em alguns tipos de ferromagnetos). Essa banda apresenta elétrons bem localizados que participam do processo de transporte unicamente através da interação de troca com elétrons de bandas do tipo s em cada eletrodo ferromagnético. Os elétrons de banda s são muito menos localizados, sendo bem descritos em termos de ondas planas uniformes

e responsáveis diretos pela contribuição dominante no processo de tunelamento. Assim:

$$\hat{\psi} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})] , \quad (2.58)$$

$$\hat{\psi}^\dagger = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}}t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})] ; \quad (2.59)$$

de tal maneira que o hamiltoniano não-perturbado pode ser encontrado a partir da expressão abaixo:

$$\hat{H}_0 = \int d^3\mathbf{r} \hat{\mathcal{H}} = \int d^3\mathbf{r} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^\dagger \cdot \nabla \psi - \int d^3\mathbf{r} \Delta_\alpha \psi^\dagger \sigma_z \psi , \quad (2.60)$$

substituindo-se as funções de onda (2.58) e (2.59) e utilizando as regras de comutação para férmions dadas pelas expressões (2.42), (2.43) e (2.44) tem-se:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) - \sigma \Delta_\alpha \right] c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}} \delta^3(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \exp[-i(\omega_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{k}})t] , \quad (2.61)$$

e sabendo que a delta de Dirac implica que $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, é possível escrever o hamiltoniano não-perturbado de um sistema de muitas partículas como:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \sigma \Delta_\alpha \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} . \quad (2.62)$$

sendo que o índice α indica o eletrodo $l(r)$ o eletrodo esquerdo (direito), $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger}$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}^\alpha$) são operadores fermiônicos de criação (aniquilação) para o vetor de onda \mathbf{k} e spin σ , $\mathcal{E}_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \sigma \Delta_\alpha$ é a energia de Hartree-Fock. As aproximações de Hartree-Fock são derivadas assumindo que não existe correlação entre os movimentos de duas partículas inseridas em um meio, coerente com os parâmetros deste trabalho (KADANOFF, BAYM, 1962). O termo $\sigma \Delta_\alpha$ indica que em um material ferromagnético existe um campo magnético interno efetivo gerado pela magnetização da banda d e representado por Δ_α . O fator σ é o índice de spin do elétron s de condução, proveniente da interação de troca do tipo $2\mu_B \vec{\sigma} \cdot \mathbf{B}_\alpha$, onde $\mathbf{B}_\alpha \approx \mu_0 \mathbf{M}_\alpha$ é o campo efetivo devido à magnetização do eletrodo α . Essa energia magnética soma-se à energia cinética com sinal condicionado ao spin, com $\sigma = +1$ ou $\sigma = -1$ para elétrons *up* ou *down*, respectivamente.

2.4 Hamiltoniano de Transferência

O tunelamento de um elétron pode também ser descrito pelo formalismo da matriz de espalhamento. Entretanto, um método que tem sido utilizado com sucesso

e será aplicado aqui é o *Hamiltoniano de Transferência*. No contexto do Hamiltoniano de transferência, a barreira de tunelamento (com pequenas dimensões) é tratada como uma perturbação para os sistemas formando os lados esquerdo e direito da junção (bem maiores). Aqui, a teoria de perturbação dependente do tempo é utilizada para obter a corrente, calculando a taxa de transferência de partículas do lado esquerdo para o lado direito e vice-versa. Uma grande vantagem do uso deste método é a de que podem-se utilizar técnicas diagramáticas da teoria quântica de campos e a Teoria de Muitos Corpos. Todavia, o modelo aplica-se somente se $T \ll 1$, isto é, se o coeficiente de transmissividade for muito pequeno (perturbação baixa).

Para ilustrar a ideia do tunelamento, pode-se observar a Figura 7. Ela representa uma junção de tunelamento magnética, com dois metais ferromagnéticos (l e r) prensando uma fina camada isolante (δ), que funciona como uma barreira de potencial. A transição de uma partícula do lado esquerdo da barreira de potencial (l) para o lado direito (r) é realizada considerando a *aniquilação* de uma quase-partícula no estado l e uma consequente *criação* de uma quase-partícula no estado r (HAUG, et al. 2004). No contexto do Hamiltoniano de transferência, os dois sistemas (l e r) representam sistemas não perturbados que, com exceção da perturbação, são independentes um do outro. A barreira está contida nos dois sistemas, assim, o sistema l compreende $x < \delta$ e o sistema r compreende $x > 0$.

O Hamiltoniano não perturbado da MTJ, que consiste na soma dos Hamiltonianos de cada lado não perturbado (eq.2.62) da barreira ($\hat{H}_0 = \hat{H}_l + \hat{H}_r$) é dado por

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{E}_{l,\mathbf{k}\sigma} c_{l,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{l,\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{E}_{r,\mathbf{k}\sigma} c_{r,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{r,\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.63)$$

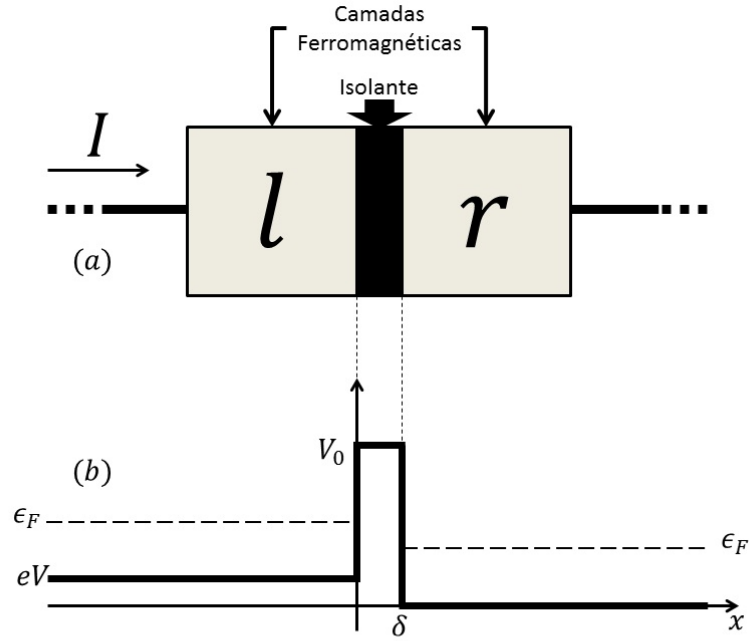
onde \mathbf{k} é o vetor de onda e $\sigma = \uparrow, \downarrow$ é o spin do elétron; e $c_{l,\mathbf{k}\sigma} (c_{l,\mathbf{k}\sigma}^\dagger)$ aniquila (cria) elétrons na esquerda e $c_{r,\mathbf{k}\sigma} (c_{r,\mathbf{k}\sigma}^\dagger)$ aniquila (cria) elétrons na direita.

O Hamiltoniano de transferência (perturbado) é dado por:

$$\hat{H}_T = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} [t_{lr} c_{l\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{r\mathbf{k}\sigma} + t_{lr}^\dagger c_{r\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{l\mathbf{k}'\sigma'}] \quad (2.64)$$

onde t_{lr} é a energia associada à transição entre os estados $c_{l,\mathbf{k}'\sigma'}$ e $c_{r,\mathbf{k}\sigma}$. O primeiro termo do Hamiltoniano corresponde à energia de transição do lado direito para o lado esquerdo, com a criação de um elétron ($c_{l\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger$) no eletrodo l (Figura 7) e aniquilação de um elétron ($c_{r\mathbf{k}\sigma}$) no eletrodo r . Já o segundo termo do Hamiltoniano corresponde à energia de transição do lado esquerdo para o lado direito, com a criação de um elétron

Figura 7: Junção de Tunelamento Magnética



(a) dois eletrodos (l e r) separados por um filme de óxido de espessura δ , percorrido por uma corrente I .

(b) gráfico qualitativo Energia Potencial *versus* Comprimento, ilustrando altura da barreira (V_0) na junção e o nível de Fermi (ϵ_F) como referência.

($c_{r\mathbf{k}\sigma}^\dagger$) no eletrodo r , (também da Figura 7) e aniquilação de um elétron ($c_{l\mathbf{k}'\sigma'}$) no eletrodo l . Ainda, a transição $\mathbf{k}\sigma \rightarrow \mathbf{k}'\sigma'$ denota que a transferência pode alterar o vetor de onda ($\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$) ou o spin ($\sigma \rightarrow \sigma'$).

Assim, obtem-se o Hamiltoniano total do sistema (FERRY, 1997):

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_T = \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{E}_{l,\mathbf{k}\sigma} c_{l,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{l,\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{E}_{r,\mathbf{k}\sigma} c_{r,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{r,\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} [t_{lr} c_{l,\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{r,\mathbf{k}\sigma} + t_{lr}^\dagger c_{r,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{l,\mathbf{k}'\sigma'}] \end{aligned} \quad (2.65)$$

Ele representa a energia total da MTJ. O termo \hat{H}_T pode conter internamente operadores bosônicos, quando os elétrons transitam de um lado a outro de uma junção, emitindo ou absorvendo excitações (fônons, mágnons, fótons, etc.).

2.5 Regra de Ouro de Fermi

A transição entre os lados da MTJ pode ser dimensionada a partir de uma taxa de transição entre os lados l e r , representados pelos estados $|l\rangle$ e $|r\rangle$, respectivamente. Esta taxa de transição, que depende do Hamiltoniano de Transferência, é encontrada a partir da teoria de perturbação dependente do tempo e é conhecida como *Regra de Ouro de Fermi*. Ela será importante neste trabalho para o cálculo da corrente de spin que atravessa a barreira de potencial.

Primeiramente assume-se que o sistema é descrito por um hamiltoniano \hat{H} que obedece à equação de Schrödinger

$$\hat{H}\psi_n = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_n, \quad (2.66)$$

e que esse hamiltoniano \hat{H} pode ser separado em $\hat{H} = H_0 + H_T$, onde H_0 é o Hamiltoniano não perturbado, cujos autoestados ψ_i são conhecidos, e H_T é o Hamiltoniano de transferência vindo da perturbação dependente do tempo. As autofunções satisfazem as condições

$$\hat{H}_0\psi_n = E_n\psi_n, \quad (2.67)$$

$$\langle\psi_a|\psi_b\rangle = \delta_{ab}; \quad (2.68)$$

sendo δ_{ab} o delta de Kronecker e $n = \mathbf{k}\sigma$: um estado qualquer dependente do vetor de onda \mathbf{k} e do spin σ de um elétron.

O objetivo principal é expressar a solução de (2.66) como soma sobre os autoestados n de \hat{H}_0 com coeficientes dependentes do tempo:

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t)\psi_n \exp\left[\frac{-iE_n t}{\hbar}\right]. \quad (2.69)$$

Assim, substituindo (2.69) em (2.66) e usando as condições de ortogonalidade em (2.68), obtem-se:

$$i\hbar\frac{dc_f(t)}{dt} = \sum_i H_{T,fi}c_i(t) \exp[i\omega_{fi}t] \quad (2.70)$$

onde $H_{T,fi} \equiv \langle\psi_f|H_T(t)|\psi_i\rangle$ é o elemento da matriz (ou transição de amplitude), que “conecta” os estados $i \rightarrow f$ e $\omega_{fi} \equiv \frac{E_f - E_i}{\hbar}$ é a frequência angular de Bohr.

A equação (2.70) é equivalente à equação de Schrödinger (2.66), porém, expressa em termos do coeficiente $c_i(t)$. A equação (2.70) pode ser resolvida explicitamente no caso de sistema simples (como os de dois níveis, por exemplo), entretanto, problemas

envolvendo estados contínuos são resolvidos somente de forma aproximada, via expansões.

Considerando H_T começando a agir em $t = 0$, constante no intervalo obtem-se a probabilidade $\mathcal{P}_f(t)$ de que o sistema passe de um estado inicial i para um estado final f como

$$\mathcal{P}_f(t) \approx \frac{4|H_{T,fi}|^2 \sin^2(\omega_{fi}t/2)}{\hbar^2 \omega_{fi}^2}. \quad (2.71)$$

Sendo a definição de taxa de transição

$$w_{i \rightarrow f} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{P}_f(t)}{t}. \quad (2.72)$$

Segundo Piza (2002), como em (2.71) $H_{T,fi}$ é constante no tempo, quando $t \rightarrow \infty$ o fator $(\sin^2(\omega_{fi}t/2)) / \omega_{fi}^2 \rightarrow 2\pi\hbar t \delta(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i)$. Assim pode-se chegar à Regra de Ouro de Fermi:

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{T,fi}|^2 \delta(\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f), \quad (2.73)$$

que pode ser representada também da forma:

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | \hat{H}_T(t) | \psi_i \rangle|^2 \delta(\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f), \quad (2.74)$$

onde, em ambos os casos, $\delta(\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f)$ é uma delta de Dirac que representa a conservação de energia. Deve-se levar em conta que a regra de ouro só é válida se o tempo t é grande o suficiente, tal que $t\Delta E \gg 2\pi\hbar$ e que a probabilidade de (2.71) seja bem menor que 1 (GALINDO, et al. 1990).

2.6 Distribuição de Fermi-Dirac

É possível compreender diversas propriedades físicas dos mais complexos tipos de materiais utilizando o modelo de elétrons livres. Esse modelo utiliza a ideia de que os elétrons de valência dos átomos constituintes são elétrons de condução e movem-se livremente por todo o volume do metal. Até mesmo em metais onde o modelo de elétrons livres funciona melhor, a distribuição de cargas dos elétrons de condução demonstra o alto potencial eletrostáticos dos núcleos iônicos. O modelo de elétrons livres torna-se mais útil para propriedades que dependem essencialmente das propriedades cinéticas dos elétrons de condução (KITTEL, 2005).

A função de distribuição de probabilidade para férmions, conhecida como *Distribuição de Fermi-Dirac*, será importante neste trabalho por dimensionar a distribuição de elétrons nas camadas ferromagnéticas. Essa distribuição depende da

temperatura e estima a quantidade de elétrons acima do nível de Fermi. Para obter a Distribuição de Fermi-Dirac, calcula-se o valor esperado do operador número de partículas no estado $\mathbf{k}\sigma$, ou seja, o número de ocupação médio (HAUGH, et al. 2004)

$$f_{\mathbf{k}\sigma} = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \frac{\text{tr} \exp[-\beta \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} (\mathcal{E}_{\mathbf{k}'} - \mathcal{E}_F) \hat{n}_{\mathbf{k}'\sigma'}] \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}}{\text{tr} \exp[-\beta \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} (\mathcal{E}_{\mathbf{k}'} - \mathcal{E}_F) \hat{n}_{\mathbf{k}'\sigma'}]}, \quad (2.75)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ é o recíproco da temperatura absoluta T , $k_B \approx 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg/s}^2 \text{ K}^{-1}$ é a constante de Boltzmann, \mathcal{E}_k é um nível de energia que tem elétrons com vetor de onda \mathbf{k} e \mathcal{E}_F é o nível de Fermi. Para calcular estas expressões, utiliza-se uma propriedade elementar da função exponencial:

$$\exp \left[-\beta \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} (\mathcal{E}_{\mathbf{k}'} - \mathcal{E}_F) \hat{n}_{\mathbf{k}'\sigma'} \right] = \prod_{\mathbf{k}'\sigma'} \exp[-\beta (\mathcal{E}_{\mathbf{k}'} - \mathcal{E}_F) \hat{n}_{\mathbf{k}'\sigma'}]. \quad (2.76)$$

Esta equação é válida, uma vez que os operadores exponenciais do lado esquerdo de (2.76) comutam. Essa afirmação decorre diretamente da comutação de operadores de número para diferentes estados. Assim, (2.75) pode ser escrita como

$$f_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\text{tr} \prod_{\mathbf{k}'\sigma'} \exp[-\beta (\mathcal{E}_{\mathbf{k}'} - \mathcal{E}_F) \hat{n}_{\mathbf{k}'\sigma'}] \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}}{\text{tr} \prod_{\mathbf{k}'\sigma'} \exp[-\beta (\mathcal{E}_{\mathbf{k}'} - \mathcal{E}_F) \hat{n}_{\mathbf{k}'\sigma'}]}. \quad (2.77)$$

Sabe-se que o operador número de partículas é diagonal na base $|n_{\mathbf{k}\sigma}\rangle$, então, é possível usar o produtório dos traços igual ao traço dos produtórios:

$$\text{tr} \prod_{\mathbf{k}'\sigma'} [\dots] = \prod_{\mathbf{k}'\sigma'} \text{tr} [\dots]. \quad (2.78)$$

Uma vez que é mais simples calcular o traço com as autofunções do operador número de partículas (2.41), tem-se que

$$\text{tr} \exp[-\beta (\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_F) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}] = \sum_{n_{\mathbf{k}\sigma}=0}^1 \exp[-\beta (\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_F) n_{\mathbf{k}\sigma}]. \quad (2.79)$$

Todos os fatores $\mathbf{k}'\sigma'$ cancelam-se no numerador e no denominador de (2.77), exceto pelos termos com $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ e $\sigma' = \sigma$. Então, a equação simplifica-se na forma

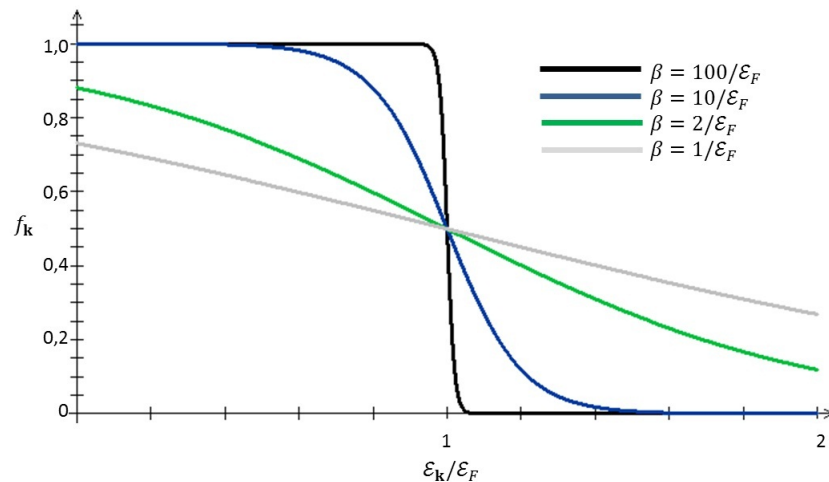
$$f_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\sum_{n_{\mathbf{k}\sigma}=0}^1 \exp[-\beta (\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_F) n_{\mathbf{k}\sigma}] n_{\mathbf{k}\sigma}}{\sum_{n_{\mathbf{k}\sigma}=0}^1 \exp[-\beta (\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_F) n_{\mathbf{k}\sigma}]} \quad (2.80)$$

Calculando as somas e rearranjando os termos, pode-se encontrar a *Distribuição de Fermi-Dirac*:

$$f_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\exp[\beta (\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_F)] + 1}. \quad (2.81)$$

Ela mostra que a função de distribuição depende somente da magnitude de \mathbf{k} e não do spin. Assim, pode-se escrever a distribuição de Fermi-Dirac simplesmente como $f_{\mathbf{k}}$. Na Figura 8 é possível acompanhar o comportamento da função com a mudança de temperatura (representada pela constante β), tendendo a uma função degrau quando a temperatura tende ao zero absoluto.

Figura 8: Função de distribuição de Fermi-Dirac a três temperaturas



A energia cinética do gás de elétrons aumenta junto com a temperatura: alguns níveis de energia, vazios em zero absoluto, são ocupados e outros níveis ocupados no zero absoluto ficam vazios. A distribuição de Fermi-Dirac dá a probabilidade de um orbital com energia $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$ ser ocupado em um gás de elétrons ideal (KITTEL, 2005).

Pode-se, ainda, obter o número total de partículas N somando a função de distribuição $f_{\mathbf{k}}$ para todos os estados \mathbf{k} , σ :

$$N = \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}} = 2 \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} . \quad (2.82)$$

Essa relação determina o nível de Fermi ($\mathcal{E}_F = \mathcal{E}_F(n, T)$) em função da densidade de partículas n e da temperatura T .

2.7 Correntes de Spin

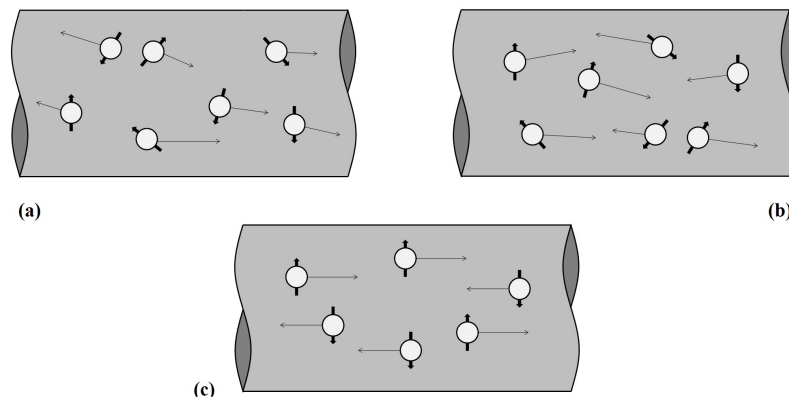
Em nanoestruturas ou filmes ultra-finos, pode-se obter transporte de elétrons a “curtas distâncias”, nas quais, um elétron tem uma probabilidade pequena de sofrer uma colisão. Em outras palavras, o caminho livre médio é maior do que as dimensões do

material. Uma vez que quase não há colisões dos elétrons, o spin se conserva. Define-se, então, a *corrente elétrica pura* em nanoestruturas como sendo

$$I_e = I_{\uparrow} + I_{\downarrow} , \quad (2.83)$$

onde I_{\uparrow} (I_{\downarrow}) é a corrente de elétrons com direção de spin *up* (*down*). Em outras palavras, pode-se afirmar que a corrente elétrica pura é uma corrente onde não há polarização de spin em sentido algum, a mais convencional em circuitos não-magnéticos. Na Figura 9a é possível observar que os elétrons não possuem polarização de spin preferida, porém, tendem a seguir da esquerda para a direita.

Figura 9: Correntes elétricas e de spin



Representações gráficas da correntes em um condutor (os elétrons e seus spins estão representados por setas “cheias” e o sentido de condução de cada um está representado por uma longa seta estreita):

(a) corrente elétrica pura; (b) corrente spin-polarizada; (c) corrente de spin pura

Na *corrente spin-polarizada* há transporte preferencial de polarização de spin em um dado sentido: temos uma tendência de elétrons de spin para cima serem conduzidos em um sentido (direita) e de elétrons com spin para baixo serem conduzidos no sentido contrário (esquerda); assim, a corrente elétrica “arrasta” os elétrons polarizados em um sentido preferencial. Na Figura 9b vê-se que elétrons com spin para cima indo à direita e elétrons com spin para baixo indo à esquerda contribuem para a corrente spin polarizada. Pode-se, dessa maneira, definir a corrente de spin como a corrente que contribui para a polarização preferencial (\uparrow), menos a corrente devido a elétrons com spin invertido (\downarrow):

$$I_{s-p} = I_{\uparrow} - I_{\downarrow} . \quad (2.84)$$

Outra definição a ser considerada é a da *corrente de spin pura*. Nessa modalidade, a corrente elétrica num sentido é igual à corrente no sentido contrário, resultando numa

corrente elétrica líquida nula. Entretanto, se houver uma corrente elétrica spin-polarizada em um sentido e a corrente no sentido contrário com spin invertido, tem-se a corrente de spin pura. Observando a Figura 9c é possível observar que há spins para cima se deslocando à direita e spins para baixo se deslocando à esquerda criando corrente de spin, embora a corrente elétrica total seja zero (AZEVEDO, 2011; REZENDE,2011). Neste caso, a corrente de spin pura pode ser definida como

$$I_s = \frac{1}{e}(I_{\uparrow} - I_{\downarrow}) , \quad (2.85)$$

onde observa-se que a corrente final não possui mesma dimensão da corrente convencional: o fator $1/e$ elimina a dependência de cargas da corrente de spin.

2.8 Tunelamento com conservação de Spin

Quando uma diferença de potencial é aplicada através de uma estrutura metal-isolante-metal, uma pequena corrente pode ser detectada. Isso ocorre porque o isolante se comporta como uma barreira finita, com potencial da ordem do gap do material. Em outros termos, a função de onda para um elétron com energia menor que a da barreira é uma onda evanescente e, portanto, esse elétron tem uma probabilidade finita de tunelar para o outro lado da barreira (Figura 7). Utilizando a abordagem do Hamiltoniano de Transferência (2.64), pode-se reescrevê-lo levando em conta a conservação do spin na passagem entre os estados:

$$\hat{H}_T = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [t_{lr} c_{l, \mathbf{k}}^{\dagger} c_{r, \mathbf{k}} + t_{lr}^{\dagger} c_{r, \mathbf{k}}^{\dagger} c_{l, \mathbf{k}'}] \quad (2.86)$$

e aplicá-la à regra de ouro de Fermi (eq. 2.74) adaptada para o contexto da GMR:

$$w_{l \rightarrow r} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle r, \mathbf{k}' | \hat{H}_T | l, \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}'}) , \quad (2.87)$$

onde $w_{l \rightarrow r}$ é a probabilidade de tunelamento do elétron do lado esquerdo (l) para o lado direito (r), $|l, \mathbf{k}\rangle$ é o estado inicial (com vetor de onda \mathbf{k}), $|r, \mathbf{k}'\rangle$ é o estado final (com vetor de onda \mathbf{k}') e $\delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}'})$ é a delta de Dirac que decorre da conservação de energia. A exemplo do que foi mostrado em 2.84, define-se aqui uma *corrente de tunelamento*, que é obtida pela regra de ouro de Fermi. Ela é baseada na transição entre dois estados distintos (nesse caso, dois lados da barreira). Desta forma, a corrente fica:

$$I_{\sigma} = -e w_{l \rightarrow r} , \quad (2.88)$$

onde foram levadas em conta a carga do elétron ($-e$) e a taxa de transição ($w_{l \rightarrow r}$), que possui dimensão inversa de tempo.

Assim, aplicando (2.87) à (2.88), pode-se obter:

$$I_\sigma = -\frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left| \langle l, \mathbf{k} | \left[t_{lr} c_{l, \mathbf{k}'}^\dagger c_{r, \mathbf{k}} + t_{lr}^\dagger c_{r, \mathbf{k}}^\dagger c_{l, \mathbf{k}'} \right] | r, \mathbf{k}' \rangle \right|^2 \delta(\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}'}) . \quad (2.89)$$

Calculando os termos separadamente e convertendo as somas sobre \mathbf{k} e \mathbf{k}' em integrais sobre $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$ e $\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}$:

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \rightarrow \int d\mathcal{E}_{\mathbf{k}} \int d\mathcal{E}_{\mathbf{k}'} D_\sigma(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}) D_{\sigma'}(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}) , \quad (2.90)$$

pode-se encontrar a corrente de tunelamento associado com o spin σ :

$$I_\sigma(V) = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\mathcal{E} T_\sigma(\mathcal{E}, eV) D_\sigma^l(\mathcal{E} - eV) D_\sigma^r(\mathcal{E}) [f_l(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F - eV) - f_r(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F)] , \quad (2.91)$$

onde e é o módulo da carga eletrônica, $T_\sigma(\mathcal{E}, eV)$ é o coeficiente de transmissão para elétrons com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ (decorrente dos coeficientes de transferência do Hamiltoniano da MTJ), D_σ^α é a densidade de estados para spin σ no eletrodo ferromagnético $\alpha = l, r$, $f_l(f_r)$ é a distribuição de Fermi-Dirac para o eletrodo esquerdo (direito) já mostrada em (2.81) e eV é a energia de potencial elétrica aplicada através da junção. Observa-se também que no eletrodo esquerdo o nível de Fermi é acrescido de uma energia eV devido à diferença de potencial aplicada na MTJ.

3 Ação MASER e aproximações clássicas

Desde os trabalhos pioneiros de Schawlow e Townes (1958), onde os autores propuseram um MASER baseado em vapor de potássio, discutem-se ideias de construção de um dispositivo com emissão coerente de ondas eletromagnéticas. Vários modelos de MASERs baseados em gás foram propostos desde então. Entretanto, modelos baseados em estado sólido, teoricamente mais práticos e baratos em suas aplicações, são escassos. É nesse ponto que se alicerça o presente trabalho: criar um modelo de MASER baseado em estado sólido. A grosso modo, planeja-se modelar uma junção de tunelamento magnética dentro de uma cavidade ressonante. A inversão de spin na transição entre os dois lados da junção de tunelamento causaria emissão de fótons com comprimento de onda determinado pelo dimensionamento da cavidade e pelos parâmetros físicos do sistema da MTJ, tais como materiais de fabricação e magnetização das camadas.

Atualmente, referências relativas a MASERs e LASERs se sobrepõem e ambas as análises seguem paralelas sendo, por vezes, impossível diferenciar o estudo de cada uma. Tanto LASERs quanto MASERs consistem num mesmo princípio: geração de radiação eletromagnética coerente via emissão estimulada, diferenciando-se somente na frequência de operação (Microondas para o MASER e luz visível para o LASER). No atual trabalho será utilizado o termo MASER de forma abrangente, englobando ambos os efeitos, assim como foi feito nos anos 50, época em que os LASERs eram conhecidos como “MASERs ópticos”.

3.1 MASER: fundamentos

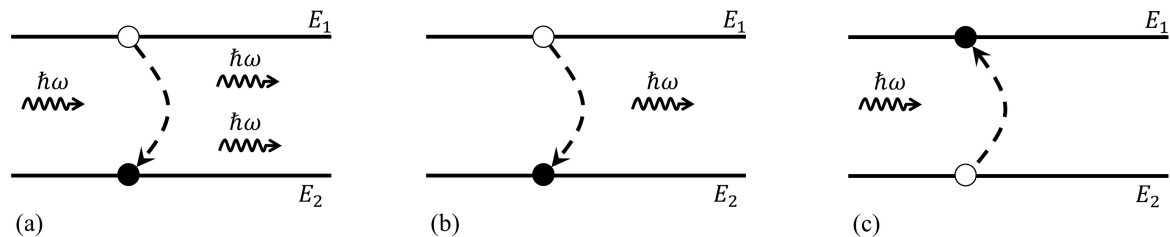
Em uma análise simplista, supõe-se que um átomo inicialmente com um elétron num nível de energia E_2 (Figura 10a) é incidido por um fóton com frequência ω (e, por consequência, com energia $\hbar\omega$). Uma vez que admite-se que o intervalo entre os níveis de energia é igual à energia do fóton incidente ($\Delta E = E_2 - E_1 = \hbar\omega$), pode-se afirmar que há uma probabilidade finita de esse fóton forçar a transição do elétron do nível E_2 para o nível

E_1 . Neste caso, a diferença de energia ΔE é liberada na forma de um fóton "idêntico" ao primeiro, isto é, com mesma fase, frequência, polarização e direção de propagação. Esse fenômeno é conhecido como *Emissão Estimulada* e foi prevista teoricamente por Einstein em 1916.

Quando o elétron executa a transição para um nível mais baixo em um átomo e emite um fóton sem a ocorrência de um fóton que incite o efeito, ele é conhecido como *Emissão Espontânea*. Esse fenômeno está representado na Figura 10b.

Ainda, quando um elétron está em um nível de energia mais baixo (E_1) e um estímulo é aplicado (fóton com energia $\hbar\omega$), o átomo tem uma probabilidade finita de absorver esse fóton e elevar o elétron para o nível de energia mais alto (E_2). Todavia, é necessário que a diferença de energia entre os dois níveis em questão seja igual ao do fóton incidente para que o fenômeno ocorra (SVELTO, 1998). Esse efeito é denominado *Absorção* e está representado na Figura 10c.

Figura 10: Representação gráfica de processos de emissão e absorção de fótons por um elétron em um sistema de dois níveis.



(a) Emissão Estimulada: liberação de um fóton devido à incidência de um outro fóton com mesma frequência (energia) (b) Emissão Espontânea: liberação de um fóton sem influência externa (c) Absorção: transição de energia para um nível mais elevado devido à incidência de um fóton externo.

O funcionamento dos MASERS fundamenta-se, como já mencionado, na emissão estimulada, justamente porque ela torna possível a amplificação de ondas eletromagnéticas de forma que a saída seja monocromática e coerente. O próprio nome MASER evoca a utilização desse fenômeno (Microwave Amplification by *Stimulated Emission* of Radiation). A Emissão Estimulada, entretanto, não é suficiente para criar o MASER em sua forma final, sendo necessário um ressonador para realimentar o sistema.

A construção de um MASER pode ser separada em três partes (STEEN, et al. 2010):

- O meio ativo (onde ocorre a emissão estimulada) (*active medium*): pode ser sólido, líquido, gás ou plasma. Acredita-se que qualquer material pode ser um meio

ativo, dependendo somente da intensidade da fonte de energia. Dentre os meios mais utilizados, podemos citar os rubis de neodímio (sólidos), corantes orgânicos dissolvidos em solventes (líquidos) e o argônio (gases).

- A fonte (ou “bombeador”) de energia (*pumping source*): qualquer fonte de energia pode ser usada como tal. Essa fonte é, primariamente, incoerente, e fornece a energia necessária para o funcionamento do MASER. A potência de saída depende da potência da fonte de energia e da quantidade de meio ativo.
- O ressonador: gera a onda eletromagnética (OEM), refletindo-a entre suas paredes, no meio ativo. Se, assim, a OEM é amplificada e se o ganho supera as perdas no ressonador, dizemos que ambos estão no limiar (*threshold*) para geração de OEM.

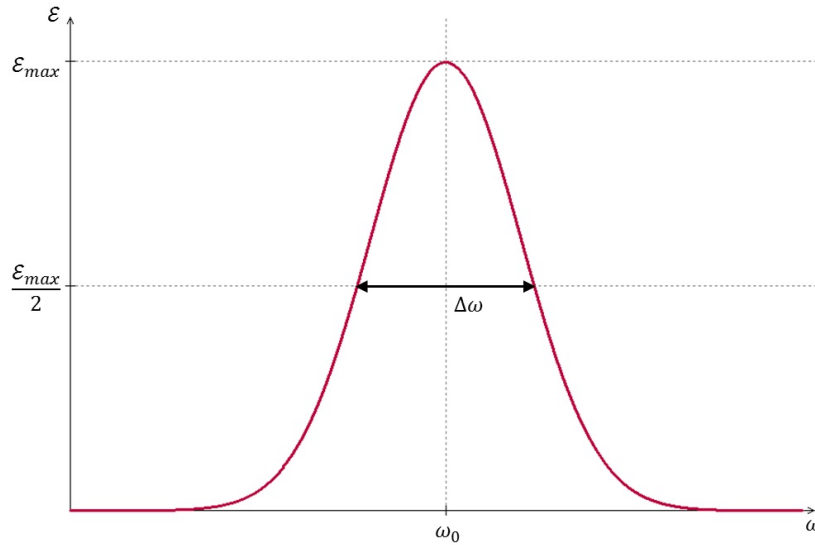
3.1.1 Cavidade Ressonante e Fator de Qualidade (Q)

Ressonadores podem ser construídos de seções de guias de onda fechados. Devido a perdas de radiação de guias de onda com saídas abertas, ressonadores feitos com guias de onda são usualmente curto-circuitados em ambos os lados, formando, assim, uma caixa fechada (ou cavidade). A energia eletromagnética é armazenada dentro da cavidade, e a potência pode ser dissipada através das paredes metálicas, bem como pelo meio ativo dentro da cavidade. Acoplamentos ao ressonador podem ser feitos por uma pequena abertura em uma das paredes (POZAR, 1998).

Segundo Jackson (1999), cavidades ressonantes possuem frequências de oscilação discretas com uma configuração de campo definida para cada frequência de ressonância. Isto implica que, se tentarmos excitar um modo de oscilação particular numa cavidade, o campo será gerado somente se a frequência de excitação for exatamente igual a frequência de ressonância escolhida. Em uma análise realística não haverá uma singularidade, como uma função delta, mas uma banda estreita de frequências ao redor da autofrequência, em torno da qual excitações relevantes podem ocorrer. Esse alargamento da banda de frequências pode ocorrer devido à dissipação de energia nas paredes da cavidade e, até mesmo, no dielétrico que preenche a cavidade. O Q da cavidade, conhecido também como *fator de qualidade*, mede o estreitamento (simbolizado por $\Delta\omega$ na Figura 11) de resposta da cavidade à uma excitação externa. Um Q alto contribui positivamente para a geração do Efeito MASER, objetivo deste trabalho, pois, diminui a absorção de fótons pelas paredes da cavidade. Ele é definido como

$$Q = \omega_0 \frac{U_{\text{arm}}}{P_{\text{dis}}} \quad (3.1)$$

Figura 11: Largura de banda ($\Delta\omega$) de um oscilador amortecido.



A largura de banda, $\Delta\omega$, de um oscilador amortecido é mostrada em um gráfico de energia *versus* frequência. Quanto maior o Q , mais estreito e “afiado” é o pico.

onde ω_0 é a frequência de ressonância, U_{arm} é a energia armazenada na cavidade e P_{dis} é a potência dissipada pelos materiais da cavidade, ou energia dissipada por unidade de tempo:

$$P_{dis} = \frac{U_{dis}}{\tau} . \quad (3.2)$$

Em uma análise microscópica, quando a energia dos fótons dentro da cavidade U_{arm} iguala-se à energia dissipada P_{dis} , pode-se definir um intervalo de tempo relacionado ao fator de qualidade da cavidade τ_p , tornando (3.1) :

$$Q = \omega_0 \cdot U_{arm} \cdot \frac{\tau_p}{U_{dis}} . \quad (3.3)$$

Como, neste caso $U_{arm} = U_{dis}$, é possível definir o tempo de vida médio de um fóton dentro de uma cavidade ressonante sendo:

$$\tau_p = \frac{Q}{\omega_0} , \quad (3.4)$$

e dependente do fator de qualidade Q e da frequência de ressonância ω_0 . Jackson (1999) ainda afirma que, independente do formato da cavidade, seu fator Q pode ser calculado como

$$Q = \frac{V_c}{\delta A_c} F_g , \quad (3.5)$$

onde A_c é a superfície total da cavidade, V_c é o volume total, F_g é um fator geométrico, $\delta = \sqrt{2/(\omega\mu_0\varsigma)}$ é a espessura das paredes da cavidade, conhecida como *skin depth* e ς é

sua condutividade elétrica.

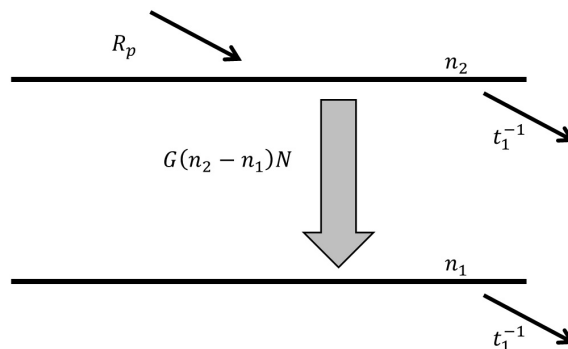
3.2 Equações de Taxa

O modelamento teórico de MASERS pode requerer diferentes níveis de sofisticação. Um tratamento quântico rigoroso pode ser utilizado e, caso seja necessário uma análise total, deve ser aplicado. Todavia, diversas propriedades podem ser encontradas a partir de aproximações semi-clássicas ou, até mesmo, puramente clássicas. As equações de taxa fazem parte do método mais simples: a aproximação clássica. A partir dela é possível extrair diversas informações relevantes.

O sistema mais simples que pode ser explicado pelas equações de taxa é o de dois níveis de energia acoplados a um reservatório. Essas equações foram uma das primeiras ferramentas utilizadas para compreensão dos MASERS, utilizados para explicar picos de intensidade comuns em MASERS de estado sólido. As equações de taxa capturam as características essenciais de um MASER monomodal (que emitem OEMs em um único padrão de oscilação, como frequência ou polarização) e podem ser modificadas para levar em conta efeitos específicos, tais como a modulação de algum parâmetro, ou a realimentação (*feedback*).

O processo mais básico envolvendo a utilização do efeito MASER pode ser observado na Figura 12. n_1 é o número de átomos no estado fundamental, n_2 é o número de átomos no estado excitado. Como serão considerados somente processos de emissão e

Figura 12: Sistema de dois níveis



Fonte: adaptado de Erneux, et. al (2010).

R_p é a taxa de bombeamento, t_1^{-1} é a taxa de decaimento de população e $G(n_2 - n_1)$ é o ganho para emissões estimuladas.

absorção, podem-se escrever as equações

$$\frac{dN}{dt} = G(n_2 - n_1)N - \frac{N}{t_C}, \quad (3.6)$$

$$\frac{dn_2}{dt} = R_p - \frac{n_2}{t_1} - G(n_2 - n_1)N, \quad (3.7)$$

$$\frac{dn_1}{dt} = -\frac{n_1}{t_1} - G(n_2 - n_1)N. \quad (3.8)$$

Elas são equações de taxa relacionadas ao número de fótons (N) de comprimento de onda MASER em (3.6); da população de elétrons no nível excitado n_2 em (3.7); e da população de elétrons no nível fundamental n_1 em (3.8).

Nessas equações, G é o coeficiente de ganho para emissão estimulada; t_C^{-1} é a taxa de decaimento devido à perda de fótons por perdas na cavidade, espalhamento, entre outros; t_1^{-1} é a taxa de decaimento para cada população e R_p é a taxa de bombeamento. Definida a inversão de população como

$$n \equiv n_2 - n_1, \quad (3.9)$$

as equações de taxa (3.6), (3.7) e (3.8) podem ser reduzidas a somente duas, para N e n :

$$\frac{dN}{dt} = GnN - \frac{N}{t_C}, \quad (3.10)$$

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{1}{t_1}(n - n_0) - 2GnN, \quad (3.11)$$

onde $n_0 \equiv R_p t_1$ é a diferença de população na ausência de OEMs do MASER. Assim, as equações de taxa (3.10) e (3.11) descrevem, respectivamente, a variação do número de fótons e a inversão de população de elétrons sem a necessidade de utilizar formalismos quânticos rigorosos. Fenômenos quânticos podem ser adicionados ou retirados a partir de termos fenomenológicos, dependendo da sua relevância para a análise específica.

Na maioria dos casos é necessário lançar mão de variações em (3.10) e (3.11), pois, em geral, o efeito MASER ocorre em sistemas com três ou quatro níveis de energia. Entretanto, essas equações podem ser utilizadas para descrever uma numerosa gama de situações, simplesmente dimensionando termos extras, que levam em conta diversas instabilidades nos sistemas (ERNEUX, et al. 2010).

4 Análise dos Resultados

O Fenômeno de transporte na MTJ pode ser descrito através do método do Hamiltoniano de transferência (FERRY, 1997). A junção é composta por dois eletrodos ferromagnéticos separados por um filme fino de óxido que representa a barreira de potencial devido ao fato de que os níveis de Fermi das camadas estão situadas na região de *gap* do filme de óxido. Como visto anteriormente em (2.63), o Hamiltoniano não perturbado pode ser escrito como:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{E}_{l,\mathbf{k}\sigma} c_{l,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{l,\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{E}_{r,\mathbf{k}\sigma} c_{r,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{r,\mathbf{k}\sigma} , \quad (4.1)$$

que consiste na energia em cada eletrodo, de forma isolada.

De acordo com Zhang (1997), pode-se escrever o termo de interação do Hamiltoniano total que torna possível a transferência de elétrons de um lado da barreira isolante para o outro. Além da transferência direta, que vem de processos elásticos, podem ser incluídas também transferências com excitações magnéticas, originadas nas trocas *s-d* entre elétrons de condução e spins localizados na interface. Dentro da teoria de mágnons, as excitações são descritas por uma transformação de Holstein-Primakoff (MATTIS,2006). Assim, o seguinte Hamiltoniano pode ser desenvolvido:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} = & \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^{l\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^r + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{r\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^l \right) + \\ & + \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^{l\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^r + c_{\mathbf{k}'\downarrow}^{r\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow}^l \right) \left(\sqrt{2S_l} b_{\mathbf{q}}^l + \sqrt{2S_r} b_{\mathbf{q}}^r \right) + \\ & + \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^{l\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^r + c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{r\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}^l \right) \left(\sqrt{2S_l} b_{\mathbf{q}}^{l\dagger} + \sqrt{2S_r} b_{\mathbf{q}}^{r\dagger} \right) + \\ & + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^{l\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^r - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{l\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^r + h.c. \right) \left(S_l + S_r - (b_{\mathbf{q}}^{r\dagger} b_{\mathbf{q}}^r + b_{\mathbf{q}}^{l\dagger} b_{\mathbf{q}}^l) \right) , \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger}$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}^\alpha$) são os operadores de criação (aniquilação) de elétrons no eletrodo $\alpha = l, r$

em um estado $\mathbf{k}\sigma$, $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d$ é o coeficiente de transmissão direta, $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J$ é o coeficiente de transmissão inelástica (dependente da integral de troca), $S^l(S^r)$ é o valor de spin no lado esquerdo (direito), N_s é o número total de spins na interface, e $b_{\mathbf{q}}^{\alpha\dagger}$ ($b_{\mathbf{q}}^\alpha$) são os operadores de criação (aniquilação) para mágnons com vetor de onda \mathbf{q} em cada interface entre a barreira e os eletrodos. O vetor de onda \mathbf{q} é bidimensional (a função de ondas do mágnon está localizada na interface, mas com comprimento de localização finito). Em geral, a corrente total obtida com (4.2) tem contribuições de processos elásticos, resultando em um tunelamento direto que conserva o spin; e de processos inelásticos, que envolvem emissão e absorção de mágnons com inversão de spin (*spin flip*). Embora seja importante conhecer o Hamiltoniano de interface com pequenas perturbações, ele não será utilizado nesta análise, pois, processos inelásticos serão considerados nas equações de taxa utilizando termos fenomenológicos.

Assim como realizado para a MTJ na Seção 2.4, é possível calcular o Hamiltoniano total da cavidade. O procedimento utilizado é semelhante ao mostrado em (2.65), onde são somados o Hamiltoniano não perturbado e o Hamiltoniano de transferência. A primeira parcela corresponde à energia de fótons na cavidade sem interação:

$$\hat{H}_{0,cav} = \sum_n \hbar\omega_n a_n^\dagger a_n , \quad (4.3)$$

que consiste simplesmente no número de fótons $N = a_n^\dagger a_n$ vezes a energia de um fóton $\hbar\omega_n$ somada para todos os modos n da cavidade. A segunda parcela corresponde à interação dos fótons com a MTJ e com o orifício da cavidade. O Hamiltoniano de interação de um só elétron inserido em um campo magnético é dado por:

$$\hat{H}_{int} = -g_S \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} , \quad (4.4)$$

onde, \mathbf{B} é o campo magnético onde o elétron está inserido, $\boldsymbol{\sigma}$ é o spin do elétron (que pode ter somente dois valores distintos $|\boldsymbol{\sigma}| = +1/2, -1/2$), $\mu_B \approx 5,788 \cdot 10^{-5} \text{eV/T}$ é o magneton de Bohr e g_S é um número sem dimensão chamado de fator-g (para o elétron, $g \approx 2$) (EISBERG; RESNICK, 1988)

Realizando os mesmos procedimentos de segunda quantização mostrados na Seção 2.3.2, é possível determinar o Hamiltoniano da cavidade:

$$\hat{H}_{I,cav} = \int \psi^\dagger \hat{H}_{int} \psi dV , \quad (4.5)$$

que, já organizado, pode ser dado por:

$$\hat{H}_{I,\text{cav}} = i \sum_{n,\alpha,\sigma} \gamma_{n\mathbf{k}\sigma} (a_n - a_n^\dagger) c_{\alpha,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\alpha,\mathbf{k},-\sigma} . \quad (4.6)$$

Para ilustrar o funcionamento do Hamiltoniano da cavidade em (4.6), podemos aplicá-lo a um estado geral. Este estado pode ser escrito como:

$$|N; \alpha\mathbf{k}, \uparrow\rangle = |N\rangle \otimes |\alpha\mathbf{k}, \uparrow\rangle , \quad (4.7)$$

onde o símbolo \otimes realiza um produto tensorial entre dois estados em espaços vetoriais diferentes: $|N\rangle$ corresponde ao estado dependente dos fótons da cavidade e $|\alpha\mathbf{k}, \uparrow\rangle$ corresponde ao estado dependente dos eletrodos $\alpha = l, r$ e vetores de onda \mathbf{k} dos elétrons com spin *up* (\uparrow). Assim, como colocado em 4.6, tem-se o Hamiltoniano da cavidade:

$$\hat{H}_{I,\text{cav}} = i \sum_{n,\alpha,\sigma} \gamma_{n\mathbf{k}\sigma} (a_n - a_n^\dagger) c_{\alpha,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\alpha,\mathbf{k},-\sigma} \quad (4.8)$$

onde tem-se uma constante de acoplamento ($\gamma_{n\mathbf{k}\sigma}$) e alguns operadores a serem aplicados a seguir. Aplicado em um estado geral, ($\hat{H}_{I,\text{cav}}|N; \alpha\mathbf{k}, \uparrow\rangle$), podem-se observar as seguintes operações:

$$c_{\alpha,\mathbf{k},-\sigma}|N; \alpha\mathbf{k}, \uparrow\rangle = |N; 0\rangle , \quad (4.9)$$

$$c_{\alpha,\mathbf{k},\sigma}|N; 0\rangle = |N; \alpha\mathbf{k}, \downarrow\rangle , \quad (4.10)$$

$$a_n^\dagger|N; \alpha\mathbf{k}, \downarrow\rangle = \sqrt{N+1} |N+1; \alpha\mathbf{k}, \downarrow\rangle . \quad (4.11)$$

Em (4.9) é aniquilado um elétron com spin *up* e em (4.10) é criado um elétron com spin *down*, completando a inversão de spin. Finalmente, em (4.10) é criado um fóton, gerando o efeito MASER.

Utilizando os resultados de (4.3) e (4.6), finalmente pode-se escrever o Hamiltoniano total de radiação e suas interações com elétrons:

$$\hat{H}_{\text{cav}} = \sum_n \hbar\omega_n a_n^\dagger a_n + i \sum_{n,\alpha,\sigma} \gamma_{n\mathbf{k}\sigma} (a_n - a_n^\dagger) c_{\alpha,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\alpha,\mathbf{k},-\sigma} , \quad (4.12)$$

sendo $c_{\alpha,\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ um operador de criação de elétrons no eletrodo α em um estado $\mathbf{k}\sigma$ e $c_{\alpha,\mathbf{k},-\sigma}$ um operador de aniquilação de elétrons no eletrodo α em um estado com mesmo \mathbf{k} , porém, com spin invertido $-\sigma$. Tem-se também $a_n(a_n^\dagger)$ o operador de aniquilação (criação) para um fóton no n -ésimo modo da cavidade, com frequência de ressonância ω_n e $\alpha = l, r$ denota o eletrodo no qual o fóton é emitido. $\gamma_{n\mathbf{k}\sigma}$ é a constante de acoplamento dependente de

modo e spin e é dada por:

$$\gamma_{n\mathbf{k}\sigma} = \mu_b \sqrt{\frac{\hbar\omega_k\mu_0}{2V_c}} \quad (4.13)$$

que tem V_c como o volume da cavidade.

Dessa forma, pode-se ver que, o primeiro termo do Hamiltoniano corresponde à energia de todos os fótons da cavidade em todos os modos e o segundo termo é a energia dos fótons aniquilados pela cavidade, menos os criados devido à absorção por spin-flip somados para cada modo, lado da junção e spin.

4.1 Equações de Taxa e Efeito MASER

Considerando somente a parte direta do processo de tunelamento, que consiste em processos elásticos sem envolver excitações de mágnons, a corrente elétrica no canal de spin σ é dada por

$$I_\sigma(V) = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\mathcal{E} T_\sigma(\mathcal{E}, eV) D_\sigma^l(\mathcal{E} - eV) D_\sigma^r(\mathcal{E}) [f_l(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F - eV) - f_r(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F)] \quad (4.14)$$

onde e é o módulo da carga eletrônica; $T_\sigma(\mathcal{E}, eV)$ é o coeficiente de transmissão para elétrons com spin σ ; D_σ^α é a densidade de estados para spin σ no eletrodo ferromagnético $\alpha = l, r$; $f_l(f_r)$ é a distribuição de Fermi-Dirac para o eletrodo esquerdo (direito) já mostrada em (2.81); e V é a diferença de potencial aplicada através da junção. Observa-se também que no eletrodo esquerdo o nível de Fermi é acrescido de uma energia eV devido à diferença de potencial aplicada. Uma vez que o objetivo principal deste trabalho não está relacionado com as características $I - V$ detalhadas da MTJ e, geralmente, será trabalhado no regime de tensão baixa, ou seja, $eV \ll \varepsilon_F$, é possível fazer uso da relação aproximada:

$$f_L(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F - eV) - f_R(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F) \approx eV\delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F), \quad (4.15)$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac. Pode-se, desta forma, obter de (4.14) a corrente direta de spin σ :

$$I_\sigma(V) = \frac{2\pi e^2 V}{\hbar} T_\sigma(\mathcal{E}_F, eV) D_\sigma^l(\mathcal{E}_F - eV) D_\sigma^r(\mathcal{E}_F). \quad (4.16)$$

Observa-se que a maior contribuição para a corrente elétrica total vem da densidade de estados calculada no nível de Fermi \mathcal{E}_F . O coeficiente de transmissão T_σ é quase independente da diferença de potencial aplicada e do spin em tensões baixas. Da

aproximação WKB pode ser obtido o coeficiente de transmissão (DARTORA, et al. 2004):

$$T_{\sigma} = \exp \left[-1,024 d \sqrt{\Phi_0} \right] \exp \left[\frac{1}{2} \frac{\eta V}{\sqrt{\Phi_0}} \right] , \quad (4.17)$$

onde Φ_0 é a altura da barreira sobre o nível de Fermi medida em elétron-volts, d é a espessura efetiva da barreira, dada em Angstroms ($1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm}$) e η é um parâmetro de ajuste. Valores típicos das constantes presentes na aproximação são $\Phi_0 = 3,0 \text{ eV}$, $d = 1,0 \text{ nm}$ e $\eta = 0,1$.

4.1.1 Densidade de spin e densidade de corrente de spin

A exemplo do procedimento realizado para encontrar a densidade Hamiltoniana em (2.56), é possível calcular outras duas densidades relevantes para a análise deste trabalho. A densidade de partículas n pode ser definida como o número de partículas N por unidade de volume V :

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{\Delta V} , \quad (4.18)$$

onde ΔV é o volume ocupado por somente uma partícula. Pode-se tomar como exemplo a densidade de cargas elétricas ρ ; ela pode ser definida como $\rho = Ne/V = e/\Delta V = ne$, onde e é a carga elementar (REITZ, 1960). Em Física Quântica, a densidade n pode ser considerada um operador:

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \psi^{\dagger}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) . \quad (4.19)$$

Assim, a densidade de spin pode ser encontrada a partir da densidade de partículas aplicada sobre o spin de somente um elétron ($\mathbf{S} = \hat{n}\boldsymbol{\sigma}$). A densidade de spin dependentes das funções de onda será, então:

$$\mathbf{S} = \hat{\psi}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma} \hat{\psi} . \quad (4.20)$$

Sabe-se que a densidade de corrente elétrica convencional é dada por $\mathcal{J} = nq\mathbf{v}$ (REITZ, 1960). A exemplo do que foi feito na densidade de spin, pode-se trocar a carga elétrica pelo spin e definir a densidade de corrente de spin:

$$\mathbf{J}^S = n\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v} . \quad (4.21)$$

transformando a densidade de partículas n em operador e substituindo \mathbf{v} por \mathbf{p}/m :

$$\mathbf{J}^S = \hat{\psi}^\dagger \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \frac{1}{m} \right) \hat{\psi} . \quad (4.22)$$

Como o operador \mathbf{p} equivale a $-i\hbar\nabla$:

$$\mathbf{J}^S = \frac{1}{m} \hat{\psi}^\dagger \boldsymbol{\sigma} (-i\hbar\nabla) \hat{\psi} ; \quad (4.23)$$

pode-se simetrizar e juntar as constantes, resultando na densidade de corrente de spin:

$$\mathbf{J}_i^S = -\frac{i\hbar}{2m} [\hat{\psi}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \nabla_i \hat{\psi} - (\nabla_i \hat{\psi}^\dagger) \boldsymbol{\sigma} \hat{\psi}] , \quad (4.24)$$

onde $\hat{\psi} = \hat{\psi}(\mathbf{x})$ é o spinor de Pauli correspondente ao campo eletrônico e o índice i corresponde à uma das coordenadas x , y e z (DARTORA, et al. 2008) (o termo $1/2$ vêm da simetrização realizada). Para esta análise, o Spinor de Pauli pode ser considerado simplesmente como um vetor com componentes complexas em um espaço vetorial bidimensional.

Uma consequência direta da corrente de spin na MTJ é a acumulação de spin próximo da interface. Diferentemente das cargas elétricas, que induzem campo elétrico em seu acúmulo, a acumulação de spin não induz um campo análogo nem forças no espaço. Ele depende do processo de dispersão das partículas para chegar a um equilíbrio. Assim, o comprimento de dispersão de spin e o tempo de relaxação de spin são dois pontos chave no problema da acumulação de spin. De forma geral, a densidade de corrente de spin \mathbf{J}_i^S e a densidade de spin \mathbf{S} obedecem a uma equação de continuidade da forma (SHEN, 2008):

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} + \nabla_i \mathbf{J}_i^S = 2g \mathbf{S} \times \mathbf{B} , \quad (4.25)$$

que descreve a evolução de um sistema juntamente com uma equação de evolução do campo magnético \mathbf{B} dentro da cavidade e tem g como uma constante de acoplamento. Como (4.25) pode ser integrada sobre o volume do eletrodo ferromagnético esquerdo (onde elétrons spin polarizados são injetados), é possível encontrar:

$$\frac{dS_z}{dt} = - \int_{\text{Vol}} \nabla_i \mathbf{J}_i^S d^3\mathbf{x} + 2g(S_x B_y - S_y B_x) , \quad (4.26)$$

sendo a polarização de spin total ao longo do eixo de quantização dada por

$$S_z = \int_{\text{Vol}} \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{z}} d^3\mathbf{x} . \quad (4.27)$$

Esta polarização de spin no eixo z será importante posteriormente para definição das configurações paralela e antiparalela comentadas no Capítulo 1.

4.1.2 Aplicação das equações de taxa

Utilizando uma série de hipóteses heurísticas que serão descritas em seguida, foram escritas duas equações que seguem a metodologia adotada em (3.10) e (3.11), ainda com algumas adições de termos fenomenológicos:

$$\frac{dS_z}{dt} = I_S - \frac{1}{\tau_m} S_z - \Gamma N S_z, \quad (4.28)$$

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{N}{\tau_p} + \Gamma N S_z - \frac{1}{\hbar\omega} P_o. \quad (4.29)$$

Elas descrevem a taxa de variação temporal da polarização do spin no eixo z (4.28) e do número de fótons dentro da cavidade (4.29) a partir de uma série de parâmetros da MTJ e da cavidade ressonante desenvolvidos a seguir.

O termo I_S corresponde à chamada corrente de spin, mostrada em (2.85). A corrente de spin que entra no volume do eletrodo esquerdo é dada por

$$I_S = - \int_{\text{Vol}} \nabla_i \mathbf{J}_i^S d^3 \mathbf{x} = \oint_A \mathbf{J}^S \cdot \hat{\mathbf{z}} d^2 \mathbf{x} = \frac{1}{e} \sum_{\sigma} \sigma I_{\sigma} = \frac{1}{e} (I_{\uparrow} - I_{\downarrow}). \quad (4.30)$$

O fator $-\frac{1}{\tau_m} S_z$ foi introduzido fenomenologicamente para levar em conta a relaxação do spin (*Spin relaxation* - causa a diminuição da polarização de spin) devido ao espalhamento elétron-magnon, sendo τ_m o tempo relacionado à relaxação.

O termo $\Gamma N S_z$ leva em conta a relaxação de spin devido à emissão de fótons. A constante Γ acopla a polarização do spin do elétron no eixo z e a taxa de emissão (ou absorção) de fótons é dada aproximadamente por

$$\Gamma \approx D_{\uparrow}(\mathcal{E}_F) D_{\downarrow}(\mathcal{E}_F) \int_{\omega} |\gamma_{n\mathbf{k}\sigma}|^2 \frac{\rho(\omega) V_c}{(2\pi)^2 \hbar} d\omega = \frac{g^2 \mu_B^2 \mu \omega}{8\pi^2} D_{\uparrow}(\mathcal{E}_F) D_{\downarrow}(\mathcal{E}_F), \quad (4.31)$$

onde μ_B é o magneton de Bohr, μ é a permeabilidade magnética do meio, V_c é o volume da cavidade, $\rho(\omega)$ é densidade de estados de fótons e N é o número de fótons dentro da cavidade. A constante Γ pode ser encontrada utilizando a constante $\gamma_{n\mathbf{k}\sigma}$ como o elemento de matriz dentro da regra de ouro de Fermi.

Outro termo incluído fenomenologicamente foi $-\frac{N}{\tau_p}$, que engloba o tempo de vida de um fóton τ_p dentro da cavidade (SVELTO, 1998), como mostrado em (3.4):

$$\tau_p = \frac{Q}{\omega_0}, \quad (4.32)$$

dependente do fator de qualidade Q e da frequência de ressonância ω .

O termo final em (4.29) é a potência de saída P_o , que pode ser escrita como

$$P_o = \frac{\hbar\omega_0 N}{\tau_o} , \quad (4.33)$$

onde $\hbar\omega$ é a energia desse fóton e N é o número de fótons ejetados. O termo τ_o é o tempo de permanência do fóton dentro da cavidade antes de ser ejetado, e pode ser calculado por:

$$\tau_o \approx \frac{\sqrt[3]{V_c} A_c}{c A_h} , \quad (4.34)$$

sendo V_c o volume da cavidade, A_c a superfície total da cavidade e A_h a área de uma pequena abertura que libera os fótons da cavidade. Essa aproximação é definida a partir do caminho médio do fóton na cavidade ($\sqrt[3]{V_c}/c$). A razão A_c/A_h foi incluída heurísticamente para levar em conta a ejeção dos fótons pelo orifício, tornando o tempo proporcional à área da cavidade e inversamente proporcional à área do orifício.

Nos estados estacionários, as taxas dS_z/dt e dN/dt são nulas, pois, não há variação no número de elétrons spin-polarizados na direção z nem no número de fótons dentro da cavidade; trata-se do equilíbrio do sistema. Assim, os termos S_z e N podem ser escritos com dependência de outros fatores mais relevantes à nossa análise:

$$S_z = \frac{1}{\Gamma} \left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_o} \right) , \quad (4.35)$$

$$N = \left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_o} \right)^{-1} (I_S - I_S^{th}) , \quad (4.36)$$

onde $I_S^{th} = S_z/\tau_m$ é definida como a corrente limiar de spin (*threshold spin current*). Ela pode ser entendida como a corrente mínima necessária para a emissão de fótons pela MTJ, superando as perdas por emissão de mágnons.

Se o número de fótons N for utilizado em (4.36) para calcular a potência de saída P_o , tem-se:

$$P_o = \hbar\omega \left(\frac{\tau_o}{\tau_p} + 1 \right)^{-1} (I_S - I_S^{th}) . \quad (4.37)$$

Observa-se teoricamente que a potência emitida P_o anula-se para $I_S < I_S^{th}$ e obedece à mesma lei de um diodo LASER para correntes de spin acima do limiar (*threshold*) (KOECHNER, et al. 2003).

4.2 Reparametrização das correntes de spin

Pode-se agora retomar o cálculo da corrente de spin total I_S entrando no eletrodo ferromagnético de interesse. De (4.16) e (4.30) obtém-se

$$I_S = \frac{2\pi e}{\hbar} T(\mathcal{E}_F) V [D_{\uparrow}^l(\mathcal{E}_F - eV) D_{\uparrow}^r(\mathcal{E}_F) - D_{\downarrow}^l(\mathcal{E}_F - eV) D_{\downarrow}^r(\mathcal{E}_F)] . \quad (4.38)$$

Uma vez que $eV \ll \mathcal{E}_F$, a densidade de estados pode ser expandida em séries de Taylor, perto do nível de Fermi, que leva a:

$$I_S = \frac{2\pi e}{\hbar} T(\mathcal{E}_F) V \left[D_{\uparrow}^l(\mathcal{E}_F) D_{\uparrow}^r(\mathcal{E}_F) - D_{\downarrow}^l(\mathcal{E}_F) D_{\downarrow}^r(\mathcal{E}_F) - eV \left(\frac{dD_{\uparrow}^l(\mathcal{E}_F)}{d\mathcal{E}} D_{\uparrow}^r(\mathcal{E}_F) - \frac{dD_{\downarrow}^l(\mathcal{E}_F)}{d\mathcal{E}} D_{\downarrow}^r(\mathcal{E}_F) \right) \right] . \quad (4.39)$$

Considerando dois eletrodos ferromagnéticos que formam uma MTJ, a estrutura de bandas pode ser descrita utilizando os seguintes parâmetros (DARTORA, et al. 2004):

$$\begin{aligned} r &\equiv \left(\frac{D_M}{D_m} \right)_F , \\ \lambda &\equiv \left(\frac{dD_M/d\mathcal{E}}{dD_m/d\mathcal{E}} \right)_F , \\ \beta &\equiv \left(\frac{1}{D_m} \frac{dD_m}{d\mathcal{E}} \right)_F , \end{aligned} \quad (4.40)$$

com m e M representando respectivamente bandas de spin minoritários e majoritários e todas as quantidades calculadas no nível de Fermi. O parâmetro r mede a taxa entre bandas de spin majoritária e minoritária; β é relacionado à variação da banda de spin minoritário com respeito à energia e λ mede a variação relativa entre a banda de spin majoritária com respeito à variação da banda de spin minoritária. Tais parâmetros foram utilizados para simplificar a ideia da variação entre densidades de estado: em vez de depender dos valores de cada densidade, a reparametrização torna claro que a corrente depende muito da razão entre elas (ou entre suas variações). Existem duas configurações possíveis:

- i *Configuração paralela (P)*: situação onde a banda de spin majoritária em um eletrodo é igual à mesma orientação de spin no outro eletrodo.
- ii *Configuração antiparalela (AP)*: situação onde a banda de spin majoritária em um eletrodo corresponde à orientação oposta no outro eletrodo.

É considerado aqui que $\sigma = \downarrow$ é a banda de spin minoritária e $\sigma = \uparrow$ é a banda de spin maioritária no eletrodo esquerdo (l) e que no eletrodo direito as bandas de spin dependem do esquema de configuração (P ou AP). Neste trabalho será dada ênfase para a configuração AP, que é mais favorável para obter inversão de população de spin, uma vez que um grande número de spins $\sigma = \uparrow$ são injetados no eletrodo que corresponde à banda de spin minoritária, criando uma tendência de inversão.

Assim, (4.39) torna-se:

$$I_S^{AP} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} T(\mathcal{E}_F) D_m^2 V^2 \beta (r - \lambda) . \quad (4.41)$$

Deve-se observar que o fator $(2\pi e^2/\hbar)T(\mathcal{E}_F)D_m^2$ pode ser obtido através do valor experimental da resistência num regime de tensões próximas de zero (R_0). Neste caso, a corrente elétrica na configuração AP, dividida pela tensão aplicada é dada por

$$\frac{I}{V} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} r T(\mathcal{E}_F) D_m^2 = \frac{1}{R_0} . \quad (4.42)$$

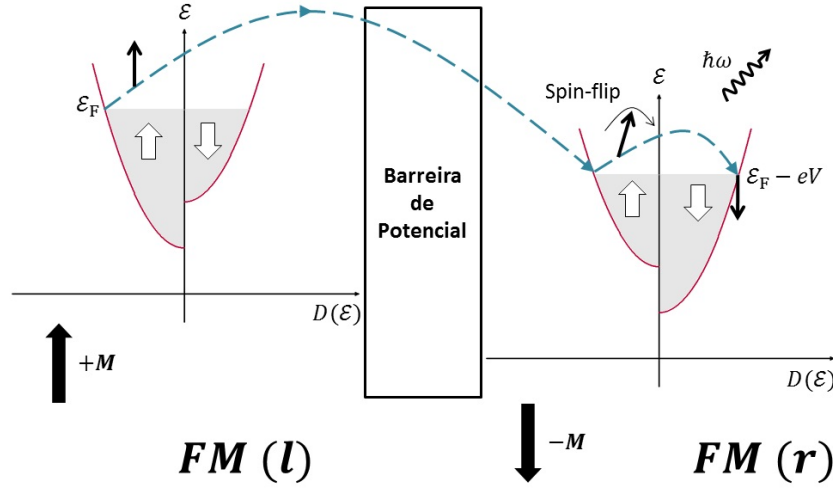
Assim, pode-se escrever (4.41) multiplicando ambos os lados da equação por $1/r$ e substituindo:

$$I_S^{AP} = \frac{\beta(1 - \lambda/r)}{R_0} V^2 . \quad (4.43)$$

É possível observar, a partir do conjunto de equações acima, que a corrente de spin na configuração AP segue uma lei quadrática dependendo da tensão aplicada ($I_S^{AP} \propto V^2$), sendo que a corrente pode ser considerada linear em uma aproximação com tensão baixa. Ainda, levando em conta a variação do coeficiente de transmissão $T(V)$ dependendo da tensão, tem-se uma dependência exponencial para as correntes elétrica e de spin a altas tensões.

Na Figura 13 observa-se um diagrama do tunelamento. O ferromagneto esquerdo (l) possui magnetização positiva e, portanto, possui a maioria dos elétrons com $\sigma = \uparrow$. Quando ocorre o tunelamento, o elétron atravessa a barreira de potencial e passa de um eletrodo com magnetização paralela para um eletrodo com magnetização antiparalela a sua. Como há níveis de energia desocupados para elétrons com $\sigma = \downarrow$, ocorre um spin-flip: o spin do elétron passa de $\sigma = \uparrow$ para $\sigma = \downarrow$ e emite um fóton ($\hbar\omega$).

Figura 13: Tunelamento entre dois ferromagnetos com *spin-flip*.



A figura esquematiza o tunelamento de um elétron com spin *up* e sua posterior inversão com emissão de um fóton. A linha tracejada indica a transição entre o ferromagneto esquerdo (*l*) e o ferromagneto direito (*r*), com magnetização anti-paralela.

4.3 Análise gráfica

4.3.1 Dimensionamento da cavidade ressonante

Uma vez que a faixa de microondas compreende frequências de 300 MHz a 300 GHz (HECHT, 2002), considera-se uma frequência MASER de aproximadamente $10 \cdot 10^9$ rad/s ($\approx 1,59$ GHz). Para este trabalho será utilizada uma cavidade ressonante cilíndrica reta com altura d_c , raio da base \mathcal{R}_c , como mostra a Figura 14 por ser uma cavidade típica. Considera-se inicialmente que cavidade é fabricada com prata e possui um orifício com raio \mathcal{R}_o por onde os fótons serão ejetados.

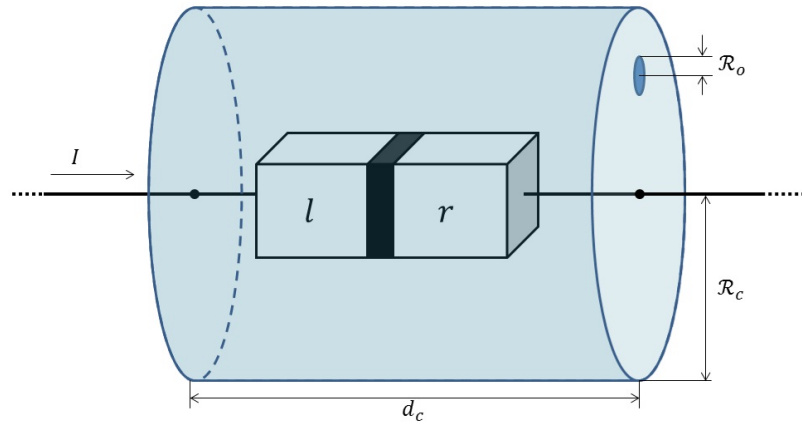
Para determinar o fator de qualidade da cavidade, será utilizado (3.5). O fator geométrico F_g para a forma da cavidade ressonante escolhida neste trabalho é dada por:

$$F_g = \left(1 + \frac{d_c}{\mathcal{R}_c}\right) \frac{1 + 0,343 \frac{d_c^2}{\mathcal{R}_c^2}}{1 + 0,209 \frac{d_c}{\mathcal{R}_c} + 0,244 \frac{d_c^3}{\mathcal{R}_c^3}}, \quad (4.44)$$

que varia de $F_g = 1$ para $d_c/\mathcal{R}_c = 0$ passando por um máximo de $F_g = 2,13$ para $d_c/\mathcal{R}_c = 1,91$ e volta a cair para 1,42 para $d_c/\mathcal{R}_c \rightarrow \infty$ (JACKSON, 1999). A frequência de ressonância desta cavidade, segundo Jackson (1999), no modo $TE_{1,1,1}$, pode ser dada por:

$$\omega_{111} = \frac{1,841}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0} \mathcal{R}} \left(1 + 2,912 \frac{\mathcal{R}^2}{d^2}\right)^{1/2} \quad (4.45)$$

Figura 14: Cavidade Ressonante



Dimensões da cavidade ressonante: cilindro reto de raio da base \mathcal{R}_c e altura d_c com um orifício de raio \mathcal{R}_o .

A MTJ na figura não está, necessariamente, em escala.

já utilizando $\mu \approx \mu_0$ e $\epsilon \approx \epsilon_0$, pois, admite-se que a cavidade é preenchida com ar. Para obter um Q máximo impõe-se que a relação entre as dimensões da cavidade é $d_c = 1,91\mathcal{R}_c$. Portanto, utilizando a frequência de ressonância já citada $\omega = 10 \cdot 10^9$ rad/s em (4.45) pode-se encontrar:

$$\mathcal{R}_c \approx 7,40 \text{ cm} , \quad (4.46)$$

$$d_c \approx 14,1 \text{ cm} . \quad (4.47)$$

Assim, o volume da cavidade e a área de superfície total serão, respectivamente:

$$V_c = \pi\mathcal{R}_c^2 d_c \approx 0,0024 \text{ m}^3 , \quad (4.48)$$

$$A_c = 2\pi\mathcal{R}_c(\mathcal{R}_c + d_c) \approx 0,100 \text{ m}^2 . \quad (4.49)$$

A espessura das paredes da cavidade (*skin depth*) pode ser dada por:

$$\delta = \sqrt{\frac{2}{\omega\mu_0\varsigma}} \approx 1,587 \text{ } \mu\text{m} , \quad (4.50)$$

onde utiliza-se a condutividade elétrica da prata $\varsigma = 6,3 \cdot 10^7$ S/m, podendo encontrar, finalmente, o fator de qualidade:

$$Q = \frac{V_c}{\delta A_c} F_g \approx 32 \cdot 10^3 . \quad (4.51)$$

A prata foi utilizada como material de simulação por possuir uma ótima condutividade elétrica. Entretanto, outros materiais, como os apresentados na Tabela 2, poderiam ser utilizados para fabricação, resultando em diferentes valores de Q .

Tabela 2: Condutividades elétricas e os respectivos fatores de qualidade para a cavidade apresentada neste trabalho.

Material	Condutividade Elétrica ς (S/m)	Q
Prata	$62,9 \cdot 10^6$	$32,3 \cdot 10^3$
Cobre	$59,9 \cdot 10^6$	$31,5 \cdot 10^3$
Alumínio	$37,7 \cdot 10^6$	$25,0 \cdot 10^3$
Tungstênio	$18,1 \cdot 10^6$	$17,3 \cdot 10^3$
Níquel	$14,6 \cdot 10^6$	$15,6 \cdot 10^3$
Ferro	$10,3 \cdot 10^6$	$13,1 \cdot 10^3$

Adaptado de Reitz, et al. (1982).

Observa-se que uma cavidade fabricada com prata possui um alto fator de qualidade e que uma cavidade de cobre seria uma substituta razoável na falta da primeira. Já cavidades de níquel ou ferro possuem Q menor do que a metade do valor da cavidade de prata, sendo insuficientes para utilização nesta análise. Um Q menor implica em um tempo de absorção menor, ocasionando uma maior absorção dos fótons pela parede da cavidade.

4.3.2 Dimensionamento da MTJ

Diversos trabalhos com propostas de MTJs foram publicados nas últimas décadas. A Tabela 3 lista algumas descobertas relevantes na área.

Tabela 3: Algumas MTJs de três camadas estudadas em trabalhos desde 1975.

Autor (ano)	Materiais da MTJ	MR	$T(K)$
Julliere (1975)	Fe/Ge/Co	14%	4,2
Miyazaki, et al. (1991)	82Ni-Fe/Al ₂ O ₃ /Co	2,7%	300
Nowak, Rauluszkiewicz (1992)	Gd/GdO _x /Fe	5,6%	4,2
Nowak, Rauluszkiewicz (1992)	Fe/GdO _x /Fe	7,7%	4,2
Miyazaki, Tezuka (1995)	Fe/Al ₂ O ₃ /Fe	30%	4,2

Adaptado de Miyazaki e Tezuka (1995).

$MR = \Delta G / \langle G \rangle$: Magnetorresistência, T : Temperatura.

Para esta análise, que utiliza eletrodos metálicos ferromagnéticos, estimam-se as densidades de estado eletrônicas utilizando uma relação de dispersão parabólica

aproximada no nível de Fermi:

$$D_{\downarrow}(\mathcal{E}_F) = \frac{V_e}{4\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\mathcal{E}_F}, \quad (4.52)$$

$$D_{\uparrow}(\mathcal{E}_F) = rD_{\downarrow}(\mathcal{E}_F), \quad (4.53)$$

sendo V_e o volume do eletrodo (l ou r), m^* a massa efetiva do elétron e \mathcal{E}_F a energia no nível de Fermi. Para volumes de eletrodos típicos na faixa de 10^{-20} m³ na MTJ, são utilizados aqui $m^* \approx 9,11 \cdot 10^{-31}$ kg e \mathcal{E}_F na faixa de 10 eV para metais como manganês ou ferro. A Tabela 4 ilustra os diferentes níveis de Fermi para cada metal. Dessa forma,

Tabela 4: Níveis de Energia de Fermi para diferentes metais

Elemento	\mathcal{E}_F [eV]
Li	4,74
Na	3,24
Cs	1,59
Ag	5,49
Au	5,53
Be	14,3
Mg	7,08
Fe	11,1
Mn	10,9
Zn	9,47
Al	11,7

Adaptado de Ashcroft et al. (1976).

o produto das duas densidades de estado resultam em

$$D_{\downarrow}D_{\uparrow} \approx r(10^{27})^2 \text{ eV}^{-2} \quad (4.54)$$

com $r \approx 2,21$, resultando em uma constante de acoplamento Γ na faixa de

$$\Gamma \approx 3 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}. \quad (4.55)$$

Os parâmetros temporais podem ser calculados utilizando as definições (4.34) e (4.32). Foram utilizados os dados da Seção (4.3.1) e um orifício com raio 6 mm, obtendo os seguinte valores:

$$\tau_o \approx 3,96 \cdot 10^{-7} \text{ s}, \quad (4.56)$$

$$\tau_p \approx 3,23 \cdot 10^{-6} \text{ s} \quad (4.57)$$

e verificar a afirmação. A corrente limiar (I_S^{th}) pode ser calculada aproximadamente como

$$I_S^{th} = \frac{1}{\tau_m} \frac{1}{\Gamma} \left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_o} \right) = 9,45 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}, \quad (4.58)$$

a partir de (4.35). Na equação acima foi considerado que a maior contribuição para o tempo de relaxação spin vem do espalhamento por mágnons que é dado por $\tau_m \approx \hbar/E_{\text{magnon}}$, sendo E_{magnon} a energia liberada em uma inversão de spin. Espectros típicos de tunelamento inelásticos de elétrons foram mostrados por Ando, et al. (2000), revelando um pico entre 12 e 20 mV e uma rápida diminuição da energia abaixo do pico, devido, provavelmente, a uma energia de corte baixa, com uma densidade de estados de mágnons cada vez menor em pequenas energias, resultando em

$$\tau_m \approx 10^{-14} \text{ s}. \quad (4.59)$$

Utilizando uma resistência elétrica na faixa de 1 k Ω e uma corrente elétrica aplicada de 10 mV (com valor médio para este tipo de aplicação) foi possível encontrar a corrente elétrica (dividida, ainda, pela carga elétrica):

$$\frac{I_e}{e} = \frac{10 \text{ mV}}{1 \text{ k}\Omega} \frac{1}{1,6 \cdot 10^{-19}} = 6 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}, \quad (4.60)$$

que é muitas ordens de grandeza maior que a corrente limiar mostrada em (??), consistente com o comportamento experimental de MTJ. Além disso, pode-se ver que a corrente limiar de spin (I_S^{th}) pode ser facilmente alcançada.

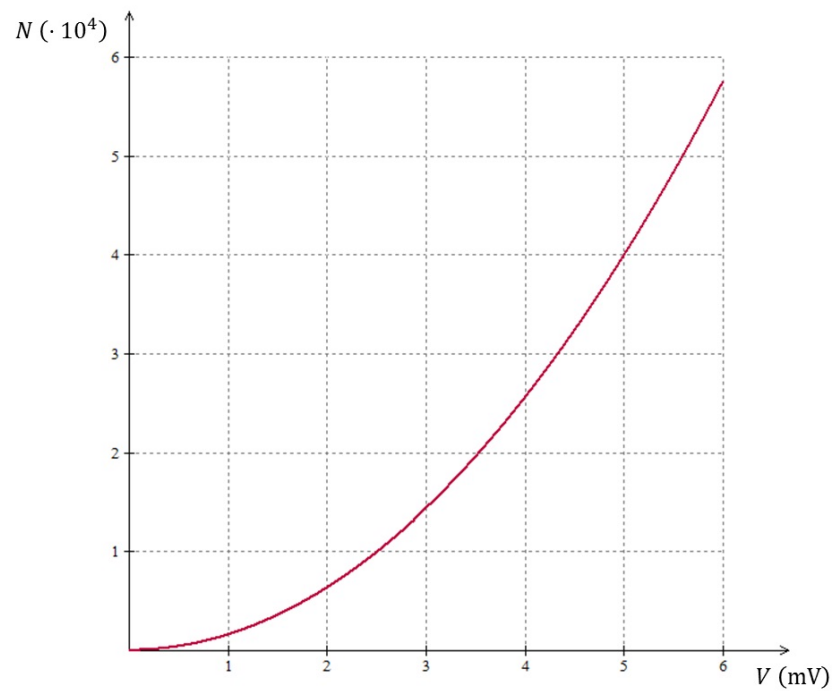
Na Figura 15 pode-se observar o número total de fótons armazenados na cavidade com $\hbar\omega$ como uma função da tensão aplicada. Por ser muito pequeno, o tempo τ_0 foi desprezado e a corrente de limiar utilizada é dada em 4.58. A condutividade pode ser aproximada por:

$$G_0 = \frac{e^2}{2\pi\hbar} T(\mathcal{E}_F) D_m^2 \approx R_0^{-1} = 1 \text{ mS}. \quad (4.61)$$

Assim, como utilizado por Dartora et al. (2004), pode-se considerar os parâmetros de densidade de estados como $\beta = 2,7\text{eV}^{-1}$, $r = 2,21$ e $\lambda = 0,07$.

Nota-se que em $V = 6 \text{ mV}$ o número de fótons chega próximo a $N = 10^5$ e a energia armazenada dentro da cavidade está na faixa de $E = N\hbar\omega = 1 \mu\text{eV}$ mas, uma vez que o número de fótons cresce dependendo diretamente de V^2 , o número de fótons pode ser facilmente aumentado dentro da cavidade.

Figura 15: Número de fótons *versus* diferença de potencial aplicada.



O número de fótons N em função da diferença de potencial aplicada V .

O número de fótons é zero até que a corrente de limiar I^{th} é alcançada.

Depois desse ponto, o número de fótons cresce com V^2 .

5 Conclusão e Perspectivas Futuras

No presente trabalho foi apresentada uma investigação sobre a possibilidade de gerar um efeito MASER através de uma junção de tunelamento magnética colocada dentro de uma cavidade ressonante, controlável por meio de uma corrente spin-polarizada. Um modelo teórico simples baseado em um Hamiltoniano de transferência e na Regra de Ouro de Fermi foi usado para derivar a corrente de spin que se insere nas equações de taxa para MASERs. Apesar de não haver aprofundamento do tratamento do mecanismo de espalhamento elétron-mágnon, seus efeitos foram incluídos na análise através de um fator que considera o tempo de relaxação de spins devido a interação elétrons-mágnons.

Uma análise utilizando valores típicos foi realizada no último capítulo, demonstrando a validade do processo. A solução em um estado estacionário mostrou que a potência de saída segue uma lei semelhante às leis de LASERs baseados em semicondutores, alterando somente a corrente elétrica convencional pela corrente spin-polarizada.

Como sugestão para trabalhos futuros, é possível desenvolver um sistema baseado em ferrofluidos, discutidos na Seção a seguir.

5.1 Perspectivas Futuras: Geração de Efeito MASER a partir de um Ferrofluido

A utilização de correntes de spin, puras ou não, a partir de junções de tunelamento magnéticas já é conhecida há algum tempo na literatura. Entretanto, uma possibilidade a ser analisada é o uso de um ferrofluido para gerar o efeito MASER desejado, utilizando a inversão de spin. Tais ideias serão consideradas neste capítulo, que se presta a construir os conceitos e propor um modelo diferenciado para geração do efeito desejado.

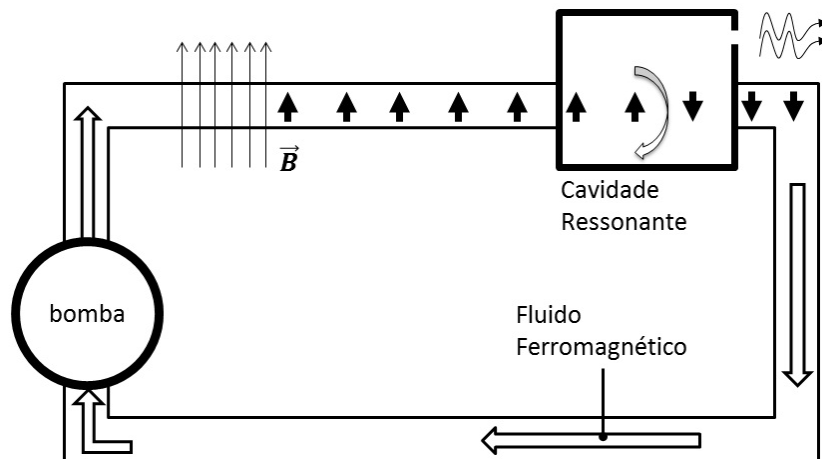
5.1.1 Ferrofluido

Ferrofluidos (conhecidos também como fluidos magnéticos) são uma categoria especial de nanomateriais, mais especificamente, nanofluidos controláveis magneticamente. Esses tipos de nanofluidos são colóides de nanopartículas magnéticas, tais como a magnetita ou ferro-carbono, dispersas de forma estável em um líquido portador. Por consequência, estes nanomateriais manifestam propriedades magnéticas e hidrodinâmicas. Macroscopicamente, a introdução de forças magnéticas nas equações hidrodinâmicas fundamentais no meio líquido magnetizável quase-homogêneo dá origem à magnetohidrodinâmica de fluidos magnéticos (ferrofluidos), conhecida também como *ferrohidrodinâmica*. As maiores dificuldades na síntese de ferrofluidos está no equilíbrio de forças, tais como a força de van der Waals, forças magnéticas ou elétricas, necessário para controlar a dispersão de nanopartículas e outros efeitos desejáveis.

5.1.2 Experimento Proposto

O experimento a ser analisado encontra-se esquematizado na Figura 16. O

Figura 16: MASER baseado em ferrofluido



ferrofluido é bombeado dentro de um duto através de um circuito fechado. Ao ser conduzido, ele passa pelo campo magnético \vec{B} e os spins das nanopartículas magnéticas que o compõem (representados por setas cheias) são alinhados e o ferrofluido acumula energia. Quando passam por uma cavidade dimensionada com frequência de ressonância na faixa de microondas, os spins são invertidos (isto é, ocorre o chamado *spin-flip*) e a nanopartícula emite um fóton. Posteriormente, os fótons são emitidos por um pequeno

orifício da cavidade ressonante. Um trabalho relacionado deverá destinar-se a resolver as seguintes questões:

- Determinação do ferrofluido com as características necessárias para polarizar-se corretamente e emitir um fóton no comprimento de onda na faixa de microondas;
- Dimensionamento da cavidade para que tenha a frequência de ressonância para microondas e do orifício;
- Dimensionamento da bomba para gerar um escoamento coerente com o experimento;
- Cálculo do campo magnético \vec{B} para alinhar corretamente o spin;
- Dimensionamento do duto que transporta o ferrofluido, bem como determinação de seu material.

Referências

- ANDO, Y.; MURAI, J.; KUBOTA, H.; MIYAZKI, T., Magnon-Assisted Inelastic Excitation Spectra Of A Ferromagnetic Tunnel Junction, **Journ. Appl. Phys.**, v. 87, n. 9, p. 5209-5211, (mai. 2000).
- ALMEIDA, A. M. O. DE, **Hamiltonian Systems - Chaos and Quantization**, 1^a ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1988 238p.
- ASHCROFT, N. W. ; MERMIN, D. N., **Solid State Physics**, 1^a ed. Fort Worth: Harcourt College Publishers, 1976 826p.
- AZEVEDO, A., **Spin pumping and spin Hall effect in magnetic metallic interfaces**, XXXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Sociedade Brasileira de Física, (jun. 2011).
- BAIBICH, M. N.; BROTO, J. M.; FERT, A.; VAN DAU, N.; PETROFF, F.; EITENNE, P.; CREUZET, G.; FRIEDERICH, A.; CHAZELAS, J., Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices, **Phys. Rev. Letters**, v. 61, n. 21, p. 2472-2475, (nov. 1988).
- BOYLESTAD, R. L.; **Introdução à Análise de Circuitos**, 8^a. ed, Rio de Janeiro: Prentice-Hall, 1998, 705p.
- CALKING, M. G.; **Lagrangian and Hamiltonian Mechanics**, 1^a. ed, Singapura: World Scientific Publishing, 1996, 215p.
- CALLISTER JR, W. K., **Ciência e Engenharia dos materiais: Uma Introdução**, 7^a. ed, Rio de Janeiro: LTC, 2008, 705p.
- COHEN-TANNOUJJI, C.; DIU, B.; LALOË, F., **Quantum Mechanics - v.1**, 1^a. ed, New York: John Wiley & Sons, 1977, 613p.
- _____, **Quantum Mechanics - v.2**, 1^a. ed, New York: John Wiley & Sons, 1977, 920p.

DARTORA, C. A.; CABRERA, G. G., Ferromagnetic tunneling junctions at low voltages Elastic versus inelastic scattering at $T=0K$, **Journ. App. Phys.**, v. 95, n. 11, p. 6058, (jun. 2004).

_____, Magnetization, Spin Current, And Spin-Transfer Torque From $SU(2)$ local gauge invariance of the nonrelativistic Pauli-Schrödinger theory, **Phys. Rev. B**, v. 78, p. 012403, (jul. 2008).

DATTA, S.; **Electronic Transport in Mesoscopic Systems**, 1^a. ed, Cambridge: Cambridge University Press, 1995, 377p.

DATTA, S.; DAS, B., Electronic analog of the electro-optic modulator, **Appl. Phys. Lett.** , v. 56, n. 7, p. 665-667, (fev. 1990).

DUAN, F.; GUOJUN, J., **Introduction to Condensed Matter Physics**, v. 1, 1^a ed, New Jersey: World Scientific Publisher, 2005 591p.

EISBERG, R. M. ; RESNICK, R.; **Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas**, 7^a. ed, Rio de Janeiro: Campus, 1988 928 p.

ENSLEY, D. L., Proton maser gain, **Phys. Rev. A**, v. 39, n. 3, p. 958-962, (fev. 1989).

ERNEUX, T.; GLORIEUX, P., **Laser Dynamics**, 1^a ed, Cambridge: Cambridge University Press, 2010, 361p.

FERRY, D. K.; GOODNICK, S. M.; **Transport In Nanostructure**, 2^a. ed, Cambridge: Cambridge University Press, 1997.

FEYNMAN, R. P.; **There's Plenty of Room at the Bottom**, Lecture, Pasadena, American Physical Society, (dez 1959).

FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. L., **The Feynman Lectures on Physics - v. 3: Quantum Mechanics**, 1^a ed, Reading: Addison-Wesley, 1964, 334p.

FILIPOWICZ, P.; JAVANAINEN, J.; MEYSTRE, P., Theory of a microscopic maser, **Physical Review A**, v. 34, n. 4, p. 3077-3087, (out. 1986).

GALINDO, A.; PASCUAL, P., **Quantum Mechanics II**, 1^a ed, Berlin: Springer-Verlag 1990, 374p.

GREINER, W.; REINHARDT, J., **Field Quantization**, 1^a ed, Berlin: Springer-Verlag, 1996, 440p.

GRIFFITHS, D. J., **Introduction to quantum Mechanics**, 1^a ed, New Jersey: Prentice Hall, 1995, 394p.

GRÜNBERG, P.; BINASCH, G.; SAURENBACH, F.; ZINN, W., Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayered exchange, **Phys. Rev. B**, v. 39, n. 7, p. 4828-4830, (mar. 1989).

HAUG, H.; KOCH, S. W., **Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors**, 4^a ed, New Jersey: World Scientific Publisher, 2004, 452p.

HENLEY, E. M.; THIRRING, W., **Elementary Quantum Field Theory**, 1^a ed, New York: McGraw-Hill, 1962, 277p.

HESS, H. F., Spin-Polarized Hydrogen Maser, **Phys. Rev. A**, v. 34, n. 2, p. 1602-160, (ago. 1986).

HECHT, E., **Optics**, 4^a ed, San Francisco: Addison Wesley, 2002, 698p.

HUANG, K., **Quantum Field Theory**, 2^a ed, Weinheim: Wiley-VCH, 2010, 424p.

IMRY, Y., **Introduction To Mesoscopic Physics**, 1^a ed, New York: Oxford University Press, 1997, 234p.

JACKSON, J. D., **Classical Electrodynamics**, 3^a ed, New York: John Wiley & Sons, 1999, 808p.

JULLIERE, M., Tunneling Between Ferromagnetic Films, **Phys. Letters**, v. 54A, n. 3, p. 225-226, (set. 1975).

KADANOFF, L. P.; BAYM, G., **Quantum Statistical Mechanics**, 1^a ed, New York: W. A. Benjamin, 1962, 203p.

KAYE, P. R.; LAFLAMME, R.; MOSCA, M., **Introduction To Quantum Computing**, 1^a ed, New York: Oxford University Press, 2007, 274p.

KITTEL, C., **Introduction To Solid State Physics**, 8^a ed, New Jersey: John Wiley & Sons, 2005, 680p.

_____, **Quantum Theory Of Solids**, 2^a. ed, New York: John Wiley & Sons, 1987, 521p.

KOECHNER, W.; BASS, M., **Solid-State Lasers: A Graduate Text**, 1^a. ed, Berlin: Springer-Verlag, 2003, 409p.

LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M., **Mechanics**, 3^a ed, Oxford: Butterworth-Heinemann, 1981, 170p.

_____, **Quantum Mechanics**, 3^a ed, Oxford: Pergamon Press, 1977, 677p.

LUGIATO, L. A.; SCULLY, M. O.; WALTHER, H., Connection between microscopic and macroscopic maser theory, **Phys. Rev. A**, v. 36, n. 2, p. 740-743, (jul. 1987).

MADELUNG, O., **Introduction To Solid State Theory**, 1^a. ed, Berlin: Springer-Verlag, 1978, 488p.

MARION, O.; THORNTON, S. T. , **Classical Dynamics of Particles and Systems**, 5^a. ed, Belmont: Brooks/Cole, 2004, 656p.

MATTIS, D. C., **The Theory Of Magnetism Made Simple: an introduction to physical concepts and to some useful mathematical methods**, 1^a. ed, New Jersey: World Scientific Publishing, 2006, 565p.

MCMAHOND, D., **Quantum Computing Explained**, 1^a. ed, New Jersey: John Wiley & Sons, 2007 322p.

MIYAZAKI, T.; TEZUKA, N., Giant Magnetic Tunneling Effect In Fe/Al₂O₃/Fe Junction, **Journ. of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 139, p. L321-L234, (out. 1995).

MIYAZAKI, T.; YAOI, T.; ISHIO, S., Large magnetoresistance effect in 82Ni-Fe/Al-Al₂O₃/Co magnetic tunneling junction, **Journ. of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 98, n. 1-2, p. L7-L9, (jul. 1991).

NIELSEN, M. A.; CHUANG I. L., **Quantum Computing Explained**, 1^a. ed, Cambridge: Cambridge University Press, 2000 511p.

NOWAK, J.; RAULUSZKIEWICZ, J., Spin dependent electron tunneling between ferromagnetic films, **Journ. of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 109, n. 1, p. 79-90, (fev 1992).

METODI, T. S.; FARUQUE, A. I.; CHONG, F. T., **Quantum Computing For Computer Architects**, 2^a.ed, San Francisco: Morgan & Claypool, 2011, 191p.

PATHRIA, R. K., **Statistical Mechanics**, 2^a. ed, Oxford: Butterworth-Heinemann, 1996, 529p.

PATTERSON, P. D.; BAILEY, B. C., **Solid State Physics**, 1^a. ed, Berlin: Springer, 2007, 717p.

PELEG, Y.; PNIN, R.; ZAARUR, E., **Schaum's Outline of Quantum Mechanics**, 1^a. ed, New York: McGraw-Hill, 1998, 312p.

POZAR, D. M., **Microwave Engineering**, 2^a. ed, New York: JohnWiley & Sons, 1998, 720p.

REITZ, J. R.; MILFORD, F. J., **Foundations of Electromagnetic Theory**, 1^a. ed, London: Addison-Wesley, 1960, 387p.

REZENDE, S. M., **Conversion of charge spin heat current**, XXXIV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Sociedade Brasileira de Física, (jun. 2011).

SAKURAI, J. J., **Modern Quantum Mechanics**, 1^a.ed, New York: Addison-Wesley Publishing Company, 1994, 500p.

SCHAWLOW, A. L.; TOWNES, C. H., Infrared and Optical Masers, **Phys. Rev.**, v. 112, n. 6, p. 1940-1949, (dez. 1958).

SCHIFF, L., **Quantum Mechanics**, 3^a. ed, New York: McGraw-Hill, 1968, 544p.

SCHILLER, C., **Motion Mountain - The Aventure of Physics**, 1^a. ed, 2007. disponível em www.motionmountain.net.

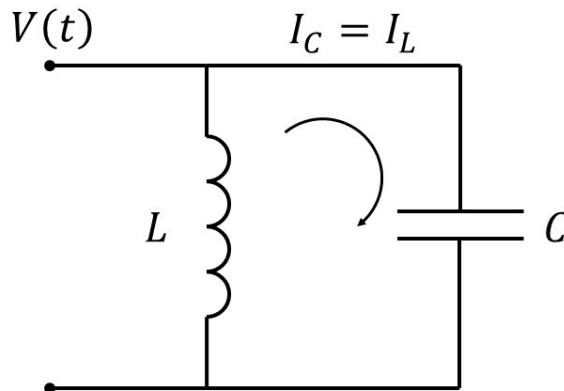
SHEN, S. Q., Spintronics and Spin Current, **AAPPS Bulletin**, v. 18, n. 5, p. 29-36 (out. 2008).

- SILFVAST, W. T., **Laser Fundamentals**, 2^a. ed, Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2004, 642p.
- STEEN, W. M. ;MAZUMDER, J., **Laser Material Processing**, 4^a. ed, Berlin: Springer-Verlag, 2010, 558p.
- SVELTO, O., **Principles of lasers**, 4^a. ed, New York: Springer, 1998, 604p.
- WHITE, R. M., **Quantum Theory Of Magnetism**, 3^a. ed, New York: Springer, 2006, 359p.
- ZHANG, S.; LEVY, P. M. MARLEY, A. C.; PARKIN, S. P., Quenching of Magnetoresistance by Hot Electrons in Magnetic Tunnel Junctions, **Phys. Rev. Lett.**, v. 79, p. 3744, (nov. 1997).
- ZHU, J-G; PARK, C., Magnetic Tunnel Junctions, **Materials Today**, v. 9, n. 11, p. 36-45, (nov. 2006).
- ZUTIC, I.; FABIAN, J.; DAS SARMA, S., Spintronics: Fundamentals and Applications, **Reviews Of Modern Physics**, v. 76, n. 2, p. 323-410, (abr. 2004).

APÊNDICE A – Formulações Lagrangiana e Hamiltoniana aplicadas a um circuito LC

Considera-se o circuito LC na Figura 17. Ele é composto por um indutor (com indutância L) e um capacitor (com capacitância C) que, quando conectados em paralelo, comportam-se como um oscilador elétrico, armazenando energia no circuito de ressonância (BOYLESTAD, 1998).

Figura 17: Circuito LC



Devido à própria estrutura do circuito, as tensões V_C e V_L , bem como as correntes I_C e I_L , são iguais entre si. As energias armazenadas no capacitor e no indutor são dadas, respectivamente, por

$$E_C = \frac{CV^2}{2}, \quad (\text{A.1})$$

$$E_L = \frac{LI^2}{2}. \quad (\text{A.2})$$

onde $V = V_C = V_L$ e $I = I_C = I_L$. Da definição da corrente elétrica do capacitor, tem-se

que

$$I_L = I_C = C \frac{\partial V}{\partial t} , \quad (\text{A.3})$$

assim, pode-se escrever a energia do indutor em função da tensão

$$E_L = \frac{LC^2}{2} \left(\frac{\partial V}{\partial t} \right)^2 . \quad (\text{A.4})$$

A partir das energias presentes no circuito é possível conceber o Hamiltoniano e o Lagrangiano, respectivamente, como

$$H = E_L + E_C ; \quad (\text{A.5})$$

$$\mathcal{L} = E_L - E_C . \quad (\text{A.6})$$

Utilizando (A.1) e (A.2) aplicados em (A.6), tem-se, desta forma, o Lagrangiano do sistema

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} C \left[LC \left(\frac{\partial V}{\partial t} \right)^2 + V^2 \right] . \quad (\text{A.7})$$

Neste caso, para adequar a teoria lagrangiana ao circuito, o potencial $V(t)$ será aplicado à formulação como uma coordenada generalizada.

Utilizando, ainda, (A.1) e (A.2) aplicados em (A.5), encontra-se o Hamiltoniano do sistema

$$H = \frac{LI^2}{2} + \frac{CV^2}{2} . \quad (\text{A.8})$$

Desta forma, pode-se fazer um paralelo entre as formulações Lagrangiana e Hamiltoniana para o oscilador harmônico simples mecânico (OHS) e o circuito LC; onde o momento p e a posição x do oscilador correspondem à corrente elétrica I e a tensão V do circuito, respectivamente. Observando-se com cuidado a expressão para o Hamiltoniano do OHS em (A.9)

$$H = \frac{p^2}{2m} + m\omega_0^2 x^2 , \quad (\text{A.9})$$

pode-se notar certa semelhança com (A.8): o primeiro termo possui uma dependência quadrática do momento (p^2), que relaciona-se à corrente elétrica (I^2); e o segundo termo possui dependência quadrática da posição (x^2), que relaciona-se à tensão (V^2).

A.1 Formulação Lagrangiana

Após determinado o Lagrangiano do sistema, ele é aplicado à equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) = 0 , \quad (\text{A.10})$$

onde $\dot{q} = \partial q / \partial t$. Na aplicação do circuito LC a tensão $V(t)$ será tomada como a coordenada generalizada q , por ser objetivo deste desenvolvimento encontrar uma relação simples para a variação da tensão no circuito.

Assim, aplicando a equação de Euler-Lagrange ao circuito LC, tem-se

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial V} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{V}} \right) = 0 , \quad (\text{A.11})$$

onde $\dot{V} = \partial V / \partial t$ e o Lagrangiano \mathcal{L} foi mostrado em (A.7) e pode ser reescrito como

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} C^2 L \left(\frac{\partial V}{\partial t} \right)^2 - \frac{CV^2}{2} . \quad (\text{A.12})$$

Derivando o Lagrangiano com relação a V e \dot{V} tem-se

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial V} = -CV , \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{V}} = C^2 L \frac{\partial V}{\partial t} . \quad (\text{A.14})$$

Utilizando (A.13) e (A.14) em (A.11) e organizando os termos, tem-se

$$\frac{\partial^2 V}{\partial t^2} + \frac{1}{LC} V = 0 . \quad (\text{A.15})$$

que trata-se da equação de “movimento” do circuito LC, homogênea e sem perdas.

A.2 Formulação Hamiltoniana

O Hamiltoniano, em sua forma mais geral, pode ser escrito como

$$H = H(q, p) = p\dot{q} - \mathcal{L} , \quad (\text{A.16})$$

onde $p = \partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}$ e q é a coordenada generalizada já mencionada na formulação Lagrangiana. Assim, para encontrar o Hamiltoniano do sistema são necessários o Lagrangiano \mathcal{L} , a coordenada generalizada q (já tomada neste caso como a tensão V) e um outro parâmetro p conhecido como momento generalizado e pode ser calculado, já

aplicado ao sistema proposto, como

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{V}} = C^2 L \frac{\partial V}{\partial t} = LCI , \quad (\text{A.17})$$

utilizando o Lagrangiano dado em (A.7) e a definição da corrente do capacitor dada em (A.3). Assim, a coordenada e o momento generalizados, juntamente com suas respectivas derivadas, aplicados ao circuito LC são dados por

$$p = LCI , \quad (\text{A.18})$$

$$q = V , \quad (\text{A.19})$$

$$\dot{p} = LC\dot{I} , \quad (\text{A.20})$$

$$\dot{q} = \dot{V} . \quad (\text{A.21})$$

Podemos aplicar os termos p e \dot{q} ao Hamiltoniano geral (A.16) e encontrar o Hamiltoniano do circuito LC

$$H = \frac{LI^2}{2} + \frac{CV^2}{2} , \quad (\text{A.22})$$

de acordo com o resultado já visto em (A.8).

Para escrever a equação de “movimento” do circuito pode-se partir das equações de Hamilton, que são dadas por

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} , \quad (\text{A.23})$$

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} . \quad (\text{A.24})$$

Neste caso, pode-se escrevê-las como

$$\dot{p} = LC\dot{I} = -\frac{\partial H}{\partial V} , \quad (\text{A.25})$$

$$\dot{q} = \dot{V} = \frac{\partial H}{\partial(LCI)} , \quad (\text{A.26})$$

e, uma vez que LC é constante, as equações de Hamilton ficam

$$LC\dot{I} = -CV , \quad (\text{A.27})$$

$$\dot{V} = \frac{I}{C} . \quad (\text{A.28})$$

Finalmente, tomando a derivada segunda de (A.28) e aplicando a primeira equação, pode-se encontrar a equação de movimento do circuito LC

$$\ddot{V} + \frac{1}{LC}V = 0 , \quad (\text{A.29})$$

obtendo, assim, o mesmo resultado da formulação Lagrangiana em (A.15).

Estes resultados obtidos podem ser utilizados para descrever a dinâmica do circuito LC, pois, as equações relacionam as constantes do circuito (indutância e capacitância) à variação da tensão, similar ao que ocorre em sistemas mecânicos clássicos, nos quais as equações de movimento baseiam-se, em geral, na variação da de uma coordenada de posição.

ANEXO A – Artigo publicado

CAMPOS, F. K. R.; DARTORA, C. A.; MATIELLI, M. H. K.; TERTULIANO, H. F., A simple model for MASER action obtained through a magnetic tunnel junction placed inside a resonant cavity, **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, v. 44, n. 11, p. 115-119, Outubro (2011), Available online 4 August 2011, ISSN 1386-9477, DOI: 10.1016/j.physe.2011.07.015.

(<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947711002827>)



A simple model for maser action obtained through a magnetic tunnel junction placed inside a resonant cavity

Fillipi Klos Rodrigues de Campos, C.A. Dartora^{*}, Marina H.K. Matielli, Horacio Tertuliano S. Filho

Electrical Engineering Department, Federal University of Parana (UFPR), Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 1 March 2011

Received in revised form

19 May 2011

Accepted 29 July 2011

Available online 4 August 2011

ABSTRACT

Magnetic tunnel junctions are currently being used in magnetoresistive reading heads, magnetic field sensors and MRAMs, due to its giant magnetoresistance effect whose roots are linked to strong spin-dependent scattering mechanisms. The existence of spin-polarized currents in such devices posed us the question over the possibility to generate coherent microwave radiation in a spin inverted population medium, maintained through a spin-polarized current. In this paper we investigate the possibility of obtaining a maser effect considering a magnetic tunnel junction placed inside a resonant cavity. We put forward a simple model based on phenomenological rate equations, being the spin-polarized currents determined by the physics of the magnetic tunnel junction.

© 2011 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Magnetic tunnel junctions (MTJs) are considered in technological applications to be used mainly as magnetoresistive reading heads, magnetic field sensors and nonvolatile magnetic random access memories due to its giant magnetoresistance (GMR) effect [1–5], based on spin-dependent scattering mechanisms proposed in the early papers by Cabrera and Falicov [6], which lead in MTJs to a strong conductance dependence on the magnetic polarization [7]. A model for spin tunneling was firstly formulated by Jullière [7] and later developed by Stearns [8] and Slonczewski [9]. Cabrera and Garcia [12] qualitatively described the GMR effect of a typical MTJ by means of the Simmons model for tunneling [13] using parabolic band structures with distinct values of densities of states for each spin at the Fermi level. Typically, the GMR effect found in MTJs is of the order of 25–30% [10,11], and points to a large ratio of the densities of states for majority (M) and minority (m) electrons at the Fermi level (E_F)

$$\frac{N_M(E_F)}{N_m(E_F)} \approx 2.0-2.5.$$

At the present stage, the electronic transport phenomena in MTJs are well understood through rigorous theoretical models taking into account not only the band structure but also electronic scattering from magnons at the ferromagnetic electrode–insulator interface, which opens the spin-flip channels, reducing the MR effect [10,14,15]. Another possible spin-flip mechanisms, besides

electron–magnon scattering have been neglected, to the best of our knowledge. This assumption is usually valid inside the ferromagnetic electrodes. However, when the MTJ is placed inside an electromagnetic cavity specially designed to resonate at a frequency ω corresponding to the energy $\Delta E = \hbar\omega$ released in an electronic spin-flip, it is expected that the spin-flip mechanism by photon emission/absorption cannot be disregarded, opening the possibility to construction of a maser-like device in a nanometric scale.

In a similar context, giant relaxation of the magnetization of crystals composed by molecular nanomagnets due to Dicke super-radiance [16] of electromagnetic waves was predicted in Ref. [17]. In recent electron spin resonance experiments, it has been observed a pronounceable resonant absorption of electromagnetic radiation by molecular nanomagnets [18,19,20–25]. In turn, they become a powerful source of coherent electromagnetic radiation when the wavelength of the emitted photons exceeds the linear size of crystals, because the molecules can coherently interact with the radiation emitted and the phase of the emitted photons may be considered the same throughout the sample [17]. Indeed, inside a resonant cavity, molecular magnets exhibit a strong dependence of the magnetization on the geometry of the cavity and this effect was observed experimentally, providing strong evidence for the coherent microwave radiation given off by the crystals, suggesting the possibility of building nanomagnetic microwave lasers pumped by magnetic fields [25–27].

The purpose of the present contribution is to describe the possibility of maser action in a ferromagnetic medium by replacing the molecular nanomagnetic crystals of the above mentioned experiments exhibiting emission of coherent radiation by a MTJ. The advantage of a MTJ over the molecular magnets is the possibility

^{*} Corresponding author.

E-mail address: cadartora@eletrica.ufpr.br (C.A. Dartora).

to control the maser effect through an applied voltage bias. To do that we put forward a simple theoretical model to describe the maser action based on rate equations, while the spin current through the MTJ is modeled by a simple transfer Hamiltonian containing a few parameters to describe the densities of states of majority and minority spins.

The MTJ is composed by two ferromagnetic electrodes (L and R) separated by a thin oxide (δ thickness) film which represents a potential barrier due to the fact that the Fermi levels of the ferromagnetic layers are situated in the gap region of the oxide film (see Fig. 1).

Fig. 2 illustrates the underlying physics of the Maser action we are looking for. In the anti-parallel (AP) configuration the magnetization of the left and right ferromagnetic electrodes have anti-parallel magnetization, which means the majority and minority spin bands are inverted. As we will see in the next section, the current flowing through the junction is spin-polarized. Majority spin band electrons in the left electrode tunnel to the right electrode, where they become minority spin carriers. This way, the minority spin band in the right electrode becomes filled above the Fermi level and a spin relaxation process assisted by photon emission of energy $\hbar\omega$ takes place. The emission process is stimulated by injection of spin-polarized electrons from the left to the right side FM electrode.

The content of this paper can be described as follows: In the next section we calculate the spin current flowing through the MTJ, introduce the rate equations to describe the maser action

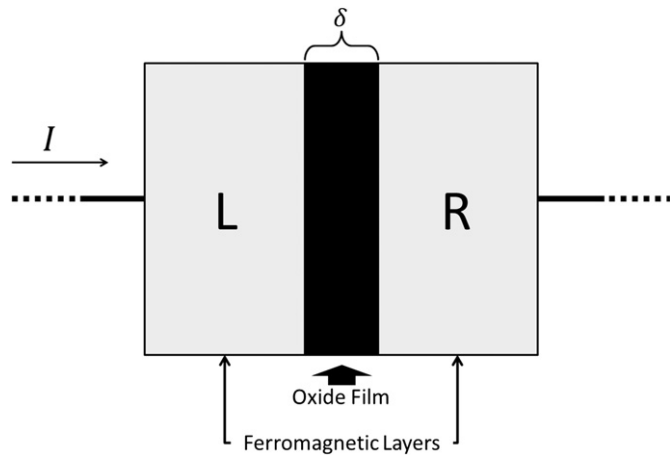


Fig. 1. Schematic of a magnetic tunnel junction.

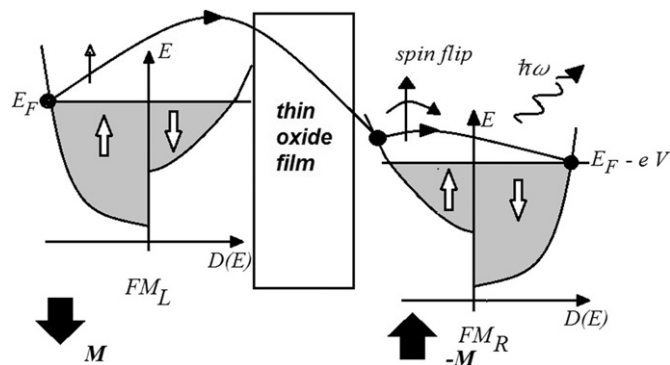


Fig. 2. Majority and minority spin densities of states of the left and right electrodes in the anti-parallel configuration. Majority spin electrons from the left electrode tunnel to the right, becoming minority spin carriers and giving rise to spin-flip by photon emission.

and estimate the values of physical parameters and in the last section, a few conclusions and remarks are added.

2. Rate equations and maser effect

The transport phenomena in the MTJ can be described by means of the transfer Hamiltonian method [28]:

$$\hat{H}_T = \sum_{kk'\sigma} [t_{kk'}^\sigma l_{k\sigma}^\dagger r_{k'\sigma} + J_{kk'}^\sigma l_{k,-\sigma}^\dagger r_{k'\sigma}] + h.c., \quad (1)$$

where $l_{k\sigma}(r_{k\sigma})$ are the annihilation fermionic operators of left (right) electrons with wavenumber k and spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, $l_{k\sigma}^\dagger$ ($r_{k\sigma}^\dagger$) are creation operators at left (right) electrodes, $t_{kk'}^\sigma$ and $J_{kk'}^\sigma$ are the transfer energy tunneling parameter for spin-conserving and spin-flipping currents. Considering only the direct part of the tunneling process, i.e., neglecting inelastic electron scattering by magnon excitations, the electric current in the spin- σ channel is easily obtained by

$$I_\sigma(V) = \frac{e}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon T_\sigma(\varepsilon, eV) D_\sigma^L(\varepsilon - eV) D_\sigma^R(\varepsilon) [f_L(\varepsilon - \varepsilon_F - eV) - f_R(\varepsilon - \varepsilon_F)], \quad (2)$$

where e is the modulus of the electronic charge, $T_\sigma(\varepsilon, eV) = |t_{kk'}^\sigma|^2$ is the transmission coefficient for the spin- σ electrons, D_σ^α is the density of states for spin σ at the $\alpha = L, R$ ferromagnetic electrode and $f(x) = 1/(1 + e^{\beta x})$ is the Fermi–Dirac distribution function, $\beta = 1/(k_B T)$ is the reciprocal of the absolute temperature T and V is the applied voltage across the junction. Since our primary concern is not related to the detailed I – V characteristics of the MTJ and usually we work in the so-called low bias regime, i.e., $eV \ll \varepsilon_F$, we can make use of the approximated relation below:

$$f_L(\varepsilon - \varepsilon_F - eV) - f_R(\varepsilon - \varepsilon_F) \approx eV \delta(\varepsilon - \varepsilon_F),$$

where $\delta(x)$ is the Dirac delta function, to obtain from (2) the direct current for the spin- σ channel, in the following way:

$$I_\sigma(V) = \frac{e^2 V}{2\pi\hbar} T_\sigma(\varepsilon_F, eV) D_\sigma^L(\varepsilon_F - eV) D_\sigma^R(\varepsilon_F). \quad (3)$$

Notice that the main contribution to the total electric current comes from the densities of states calculated at the Fermi level ε_F and the transmission coefficient T_σ is nearly independent from the applied voltage and spin at very low bias. From the WKB approximation we get

$$T_\sigma = T_0 \exp[-1.024 d \sqrt{\Phi_0}] \exp\left[\frac{1}{2} \frac{\eta V}{\sqrt{\Phi_0}}\right],$$

where T_0 is a constant, Φ_0 is the barrier height above the Fermi level measured in electron-volts, d is the effective thickness of the barrier given in $\text{\AA} = 0.1 \text{ nm}$, and η is a fitting parameter. Typical values are $\Phi_0 = 3.0 \text{ eV}$, $d = 1.0 \text{ nm}$ and $\eta = 0.1$ [14].

The total electric current flowing from the left to the right electrode is given by $I_e = \sum_\sigma I_\sigma = I_\uparrow + I_\downarrow$, but our concern here is to calculate the spin current flowing through the junction from the left to the right electrode. First, we introduce the maser rate equations, obtained through the theory outlined in Ref. [29], in which a spin current density is defined as follows:

$$\mathbf{S} = \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi, \quad (4)$$

$$\mathbf{J}_i^S = \frac{-i}{2m} [\psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \partial_i \psi - (\partial_i \psi^\dagger) \boldsymbol{\sigma} \psi], \quad (5)$$

where $\psi(\mathbf{x})$ is a Pauli spinor corresponding to the electronic field, \mathbf{S} is a spin density field and \mathbf{J}_i^S is the spin current density. The above quantities obey a ‘‘continuity’’ equation of the form:

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} + \partial_i \mathbf{J}_i^S = 2g \mathbf{S} \times \mathbf{B}, \quad (6)$$

which describe the evolution of the system together with an equation for the evolution of the photon magnetic field \mathbf{B} inside the cavity. Taking advantage of the form of Eq. (6) we integrate it over the volume of the left ferromagnetic electrode, where the spin-polarized electrons are injected, to get

$$\frac{dS_z}{dt} = - \int_{\text{Vol}} \partial_i \mathbf{j}_i^S d^3 \mathbf{x} + 2g(S_x B_y - S_y B_x)$$

being $S_z = \int_{\text{Vol}} \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{z}} d^3 \mathbf{x}$ the total spin polarization along the quantization axis. The approximated rate equations obtained in this way are given below:

$$\frac{dS_z}{dt} = I_S - \frac{1}{\tau_m} S_z - \Gamma N S_z, \quad (7)$$

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{N}{\tau_p} + \Gamma N S_z - \frac{1}{\hbar \omega} P_o, \quad (8)$$

where

$$I_S = - \int_{\text{Vol}} \partial_i \mathbf{j}_i^S d^3 \mathbf{x} = \oint_A \mathbf{j}^S \cdot \hat{\mathbf{z}} d^2 \mathbf{x} = \frac{1}{e} \sum_{\sigma} \sigma I_{\sigma} = \frac{1}{e} (I_{\uparrow} - I_{\downarrow}) \quad (9)$$

is the spin current entering the volume of the left ferromagnetic electrode, the factor $-(1/\tau_m)S_z$ was introduced phenomenologically to take into account spin relaxation due to electron–magnon scattering, being τ_m the related relaxation time, the term $\Gamma N S_z$ accounts for the spin relaxation due to emission of photons, where

$$\Gamma \approx D_{\uparrow}(\epsilon_F) D_{\downarrow}(\epsilon_F) \int_{\omega} |\gamma_{\mathbf{nk}\sigma}|^2 \rho(\omega) V_c / [(2\pi)^2 \hbar] d\omega = \frac{g^2 \mu_B^2 \mu \omega}{8\pi^2} D_{\uparrow}(\epsilon_F) D_{\downarrow}(\epsilon_F)$$

is the coupling constant between electron spin and photons representing the rate of emission or absorption of photons, $\gamma_{\mathbf{nk}\sigma}$ is a coupling constant which depends on the electron spin and electromagnetic mode, μ_B is the Bohr magneton, μ is the magnetic permeability of the medium, V_c is the cavity volume, $\rho(\omega)$ is photon density of states and N is the photon number inside the cavity. We have included another phenomenological term, $-N/\tau_p$, to account for the photon lifetime τ_p inside the cavity; τ_p is essentially related to the quality factor Q of the cavity by the following expression [30]:

$$\tau_p = \frac{Q}{\omega}, \quad (10)$$

$$Q = \frac{V_c}{\delta A_c} F_g, \quad (11)$$

where A_c is the total cavity surface, V_c its total volume, F_g a geometrical factor and $\delta = \sqrt{2/(\omega \mu_0 \sigma)}$ is the skin depth, σ is the electrical conductivity of the cavity walls. The last term in Eq. (8) is the output power P_o , which can be written as $P_o = \hbar \omega N / \tau_o$, where τ_o is the time spent by a photon inside the cavity before being ejected to the outside:

$$\tau_o \approx \frac{V_c^{1/3} A_h}{c A_c}$$

being V_c the cavity volume, A_c the total cavity surface area and A_h the area of a small aperture allowing the photons to come out of the cavity. It is also possible to construct the spin-based maser rate equations (7) and (8) analyzing the detailed balance of spin and photon numbers.

The steady state solution of Eqs. (7) and (8) is reached at

$$S_z = \frac{1}{\Gamma} \left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_o} \right), \quad (12)$$

$$N = \left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_o} \right)^{-1} (I_S - I_S^{\text{th}}), \quad (13)$$

where $I_S^{\text{th}} = S_z / \tau_m$ is the threshold spin current. Notice that the emitted power P_o vanishes for $I_S < I_S^{\text{th}}$ and the MTJ maser obeys a similar law for a laser diode, but the electric current must be replaced by the spin current. Explicitly written, above the threshold current we obtain

$$P_o = \frac{\hbar \omega}{\tau_o} (I_S - I_S^{\text{th}}). \quad (14)$$

Now we turn attention to the determination of the total spin current I_S entering the ferromagnetic electrode of interest. From Eqs. (3) and (9) we obtain

$$I_S = \frac{e}{2\pi \hbar} T(\epsilon_F) V \left[D_{\uparrow}^L(\epsilon_F - eV) D_{\uparrow}^R(\epsilon_F) - D_{\downarrow}^L(\epsilon_F - eV) D_{\downarrow}^R(\epsilon_F) \right]. \quad (15)$$

Since $eV \ll \epsilon_F$ we can expand the densities of states in Taylor series, near the Fermi level, which straightforwardly leads to

$$I_S = \frac{e}{2\pi \hbar} T(\epsilon_F) V \left[D_{\uparrow}^L(\epsilon_F) D_{\uparrow}^R(\epsilon_F) - D_{\downarrow}^L(\epsilon_F) D_{\downarrow}^R(\epsilon_F) - eV \left(\frac{dD_{\uparrow}^L(\epsilon_F)}{d\epsilon} D_{\uparrow}^R(\epsilon_F) - \frac{dD_{\downarrow}^L(\epsilon_F)}{d\epsilon} D_{\downarrow}^R(\epsilon_F) \right) \right]. \quad (16)$$

Considering a MTJ consisting of two identical ferromagnetic electrodes the band structure can be described through the following set of parameters [14]:

$$r \equiv \left(\frac{D_M}{D_m} \right)_F, \quad \lambda \equiv \left(\frac{dD_M/d\epsilon}{dD_m/d\epsilon} \right)_F, \quad \beta \equiv \left(\frac{1}{D_m} \frac{dD_m}{d\epsilon} \right)_F, \quad (17)$$

with all quantities evaluated at the Fermi level, and m and M stand for minority and majority spin bands, respectively. The parameter r measures the majority to minority spin bands ratio, β is related to the minority spin band variation with respect to energy and λ measures the relative variation of the majority spin band with respect to the variation of the minority spin band. There are two allowed configurations: (i) the parallel (P) configuration, corresponding to the situation where the majority spin band in one electrode corresponds to the same spin orientation in the other electrode and (ii) the anti-parallel (AP) configuration, in which the majority spin band in one electrode corresponds to the opposite spin orientation in the other electrode. We consider that $\sigma = \downarrow$ is the minority spin band and $\sigma = \uparrow$ is the majority spin band at the left electrode, but at the right electrode it depends on the configuration scheme. Here, we focus on the AP configuration, which is the most favorable to attain population inversion of spin, since a large number of $\sigma = \uparrow$ spins are injected in the electrode where it corresponds to the minority spin band. In this way we obtain

$$I_S^{\text{AP}} = \frac{e^2}{2\pi \hbar} T(\epsilon_F) D_m^2 V^2 \beta (r - \lambda). \quad (18)$$

Notice the factor $(e^2/2\pi \hbar) T(\epsilon_F) D_m^2$ can be obtained through the experimental value of resistance near the zero bias, R_0 . In this situation the electric current in the AP configuration, divided by the applied voltage bias is given by $I/V = (e^2/2\pi \hbar) r T(\epsilon_F) D_m^2 = 1/R_0$, leading to the relation $(e^2/2\pi \hbar) T(\epsilon_F) D_m^2 = 1/(rR_0)$, allowing to write the above equation in the following form:

$$I_S^{\text{AP}} = \frac{\beta(1-\lambda/r)}{R_0} V^2. \quad (19)$$

It is clear from the above equations that the spin current in the AP configuration follows a quadratic law with applied bias ($I_S^{\text{AP}} \propto V^2$)

while the electric current is only linear to a first approximation in the low bias regime. Obviously, taking into account the variation of the transmission coefficient $T(V)$ with the applied voltage bias will lead to an exponential dependence for both the spin and electric currents at higher voltages.

Now, we consider some realistic situation, in which a maser device tuned to $f \approx 10$ GHz based on a MTJ is placed inside a resonant cavity with high quality factor given by $Q = 6.28 \times 10^3$ [30]. We will not comment on the geometry of the cavity, since a detailed analysis of the cavity design is beyond the scope of the present paper, which is limited to the analysis of maser action through a MTJ. Assuming $\mu \approx \mu_0$, for ferromagnetic metallic electrodes we can estimate the electronic densities of states using an approximate parabolic dispersion relation at the Fermi level, $D_{\downarrow}(\varepsilon_F) = V_e/(4\pi^2) \times (2m^*/\hbar^2)^{3/2} \sqrt{\varepsilon_F}$, $D_{\uparrow}(\varepsilon_F) = rD_{\downarrow}(\varepsilon_F)$, being V_e the volume of the referred electrode, m^* the electron effective mass and ε_F the Fermi level. For typical electrode volumes in the range of 10^{-20} m³ in a MTJ, we use $m^* \sim 9.11 \times 10^{-31}$ kg and ε_F in the range of 10 eV for metals like Fe and Co, to get the order of magnitude of $D_{\downarrow}D_{\uparrow} \approx r(10^{27})^2$ eV⁻², with $r \sim 2$, allowing to obtain the coupling constant Γ in the range of $\Gamma \approx 3 \times 10^{11}$ s⁻¹. Since τ_o is much larger than $\tau_p = Q/\omega = 10^{-7}$ s the threshold spin current can be calculated from Eq. (12), yielding

$$I_S^{th} \approx \frac{1}{\Gamma \tau_p \tau_m} = 3.2 \times 10^9 \text{ s}^{-1}.$$

In the above expression we considered that the main contribution to the spin relaxation time comes from magnon scattering and is given by $\tau_m \approx \hbar/E_{magnon}$, being E_{magnon} the magnon energy released in a spin-flip. Typical IET magnon spectra are shown by Ando and coworkers in Ref. [1], displaying a strong peak around 12–20 mV and a rapid decrease for energies below the peak, due probably to a low energy cutoff, with a vanishing magnon density of states at very small energies, giving $\tau_m \sim 10^{-14}$ s. Notice that the electric current (divided by electric charge) flowing through a typical junction with tunneling resistance in the range of ~ 1 k Ω [31] subjected to an applied voltage bias of ~ 10 mV is given by

$$\frac{I_e}{e} = \frac{10 \text{ mV}}{1 \text{ k}\Omega} \frac{1}{1.6 \times 10^{-19}} = 6 \times 10^{13} \text{ s}^{-1},$$

which is greater than the spin current by several orders of magnitude, consistent with the observed experimental behavior

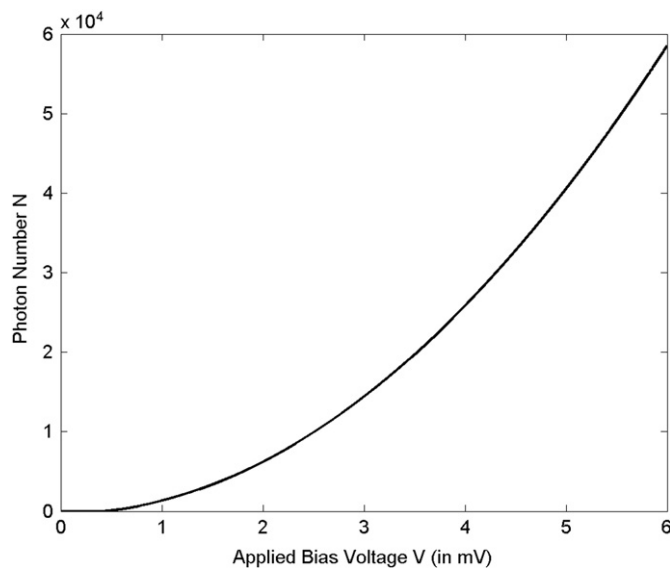


Fig. 3. Photon number N as a function of the applied voltage. The photon number is zero until the threshold current is reached. After that point the photon number grows with V^2 .

in MTJs showing that the phenomena associated with the electric current are more important than those produced by spin-polarized currents. Another conclusion is that the threshold spin current can be easily achieved.

In Fig. 3 we illustrate the total photon number $N \approx \tau_p(I_S - I_S^{th})$ stored inside the cavity with $\hbar\omega$ as a function of the applied voltage bias, neglecting the time τ_o and considering the threshold current to be given by $I_S^{th} \approx 3.2 \times 10^9$ s⁻¹. The other parameters are $G_0 = (e^2/2\pi\hbar)T(\varepsilon_F)D_m^2 \approx 1$ ms, in agreement with $R_0 \sim 1$ k Ω for a typical MTJ and $\beta = 2.7$ eV⁻¹, $r = 2.21$ and $\lambda = 0.07$ taken from Ref. [14]. Notice that at $V = 6$ mV the photon number tends to $N = 10^5$ and the stored energy inside the cavity is in the range of $E = N\hbar\omega = 1$ μ eV, but since the photon number grows as a function of V^2 we can easily enhance the photon number inside the cavity.

3. Conclusions

In summary, in this paper, we investigate the possibility of maser action through a MTJ placed inside a resonant cavity, which would be controllable by means of spin-polarized currents. A simple theoretical model based on transfer hamiltonian was used to derive the spin current which enters the maser rate equations. In the present contribution the electron–magnon scattering mechanisms was not included in details but the effects were taken into account by a dumping factor considering spin relaxation time due to electron–magnon interaction. The solution of a steady state regime showed that the output power follows a law similar to the semiconductor laser diode, but the electric current must be replaced by the spin-polarized current. A fully quantum-mechanical treatment of the problem presented here, based on the junction Hamiltonian given in Ref. [14] is left for a future contribution.

Acknowledgments

C.A. Dartora would like to thank CNPq for partial financial support. The authors also thank the anonymous referee for useful suggestions that improved the readability of the manuscript.

References

- [1] Y. Ando, J. Murai, H. Kubota, T. Miyazaki, J. Appl. Phys. 87 (2000) 5209.
- [2] X.H. Xiang, T. Zhu, J. Du, G. Landry, J.Q. Xiao, Phys. Rev. B 66 (2002) 174407.
- [3] J.J. Akerman, I.V. Roushchin, J.M. Slaughter, R.W. Dave, I.K. Schuller, Europhys. Lett. 63 (2003) 104.
- [4] F. Montaigne, J. Nassar, A. Vaurès, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, A. Schuhl, A. Fert, Appl. Phys. Lett. 73 (1998) 2829.
- [5] T. Miyazaki, N. Tezuka, J. Magn. Magn. Mater. 139 (1995) L231.
- [6] [a] G.G. Cabrera, L.M. Falicov, Phys. Status Solidi B 61 (1974) 539;
[b] G.G. Cabrera, L.M. Falicov, Phys. Rev. B 11 (1975) 2651.
- [7] M. Jullière, Phys. Lett. A 54 (1975) 225.
- [8] M.B. Stearns, J. Magn. Magn. Mater. 5 (1997) 167.
- [9] J.C. Slonczewski, Phys. Rev. B 39 (1989) 6995.
- [10] S. Zhang, P.M. Levy, A.C. Marley, S.S.P. Parkin, Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 3744.
- [11] [a] J.S. Moodera, J. Nowak, R.J.M. van de Veerdonk, Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 2941;
[b] R.J.M. van de Veerdonk, J.S. Moodera, W.J.M. de Jonge, J. Magn. Magn. Mater. 199 (1999) 152;
[c] J.S. Moodera, G. Mathon, J. Magn. Magn. Mater. 200 (1999) 248.
- [12] G.G. Cabrera, N. García, Appl. Phys. Lett. 80 (2002) 1782.
- [13] J.G. Simmons, J. Appl. Phys. 34 (1963) 1793.
- [14] C.A. Dartora, G.G. Cabrera, J. Appl. Phys. 95 (2004) 6058–6064.
- [15] C.A. Dartora, G.G. Cabrera, Phys. Rev. B 72 (2005) 014424.
- [16] R.M. Dicke, Phys. Rev. 93 (1954) 439.
- [17] E.M. Chudnovsky, D.A. Garanin, Phys. Rev. Lett. 89 (2002) 157201.
- [18] C. Calero, E.M. Chudnovsky, D.A. Garanin, Phys. Rev. B 72 (2005) 024409.
- [19] W. Wernsdorfer, S. Bhaduri, C. Boskovic, G. Christou, D.N. Hendrickson, Phys. Rev. B 65 (2002) 180403.
- [20] A.L. Barra, D. Gatteschi, R. Sessoli, Phys. Rev. B 6 (1997) 8192.

- [21] S. Hill, J.A.A.J. Perenboom, N.S. Dalal, T. Hathaway, T. Stalcup, J.S. Brooks, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 2453.
- [22] E. Del Barco, J.M. Hernandez, J. Tejada, N. Biskup, R. Achey, I. Rutel, N.S. Dalal, J.S. Brooks, *Phys. Rev. B* **62** (2000) 3018.
- [23] A.B. Suchkov, B.R. Jones, J.L. Musfeldt, Y.J. Wang, R.M. Achey, N.S. Dalal, *Phys. Rev. B* **63** (2001) 214408.
- [24] B. Parks, J. Loomis, E. Rumberger, D.N. Hendrickson, G. Christou, *Phys. Rev. B* **64** (2001) 184426.
- [25] R. Amig, J. Tejada, E.M. Chudnovsky, J.M. Hernandez, A. Garcia-Santiago, *J. Magn. Magn. Mater.* **272–276** (2004) 1106–1108.
- [26] C.A. Dartora, G.G. Cabrera, K.Z. Nobrega, *Braz. J. Phys.* **39** (2009) 587–591.
- [27] C.A. Dartora, G.G. Cabrera, K.Z. Nobrega, *Am. J. Phys.* **77** (2009) 742–745.
- [28] [a] D.K. Ferry, S.M. Goodnick, *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997;
- [b] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford University Press, Oxford, 1997.
- [29] C.A. Dartora, G.G. Cabrera, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 012403.
- [30] J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, third ed., John Wiley, New York, 1998.
- [31] W.J. Gallagher, S.S.P. Parkin, Y. Lu, X.P. Bian, A. Marley, K.P. Roche, R.A. Altman, S.A. Rishon, C. Jahnes, T.M. Shaw, J. Gang Xiao, *Appl. Phys.* **81** (1997) 3741.