

Julhiana de Freitas Vargas

**Estudo da influência dos parâmetros de ajuste  
do algoritmo de Metrópolis na determinação da  
temperatura crítica supercondutora de redes de  
junções Josephson**

Vitória - ES, Brasil

2022

Julhiana de Freitas Vargas

**Estudo da influência dos parâmetros de ajuste do algoritmo de Metrópolis na determinação da temperatura crítica supercondutora de redes de junções Josephson**

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Espírito Santo, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de mestre em física.

Universidade Federal do Espírito Santo – UFES

Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Valberto Pedruzzi Nascimento

Coorientador: Prof. Dr. Jorge Luis Gonzalez Alfonso

Vitória - ES, Brasil

2022

Ficha catalográfica disponibilizada pelo Sistema Integrado de Bibliotecas - SIBI/UFES e elaborada pelo autor

---

V297e Vargas, Julhiana de Freitas, 1997-  
Estudo da influência dos parâmetros de ajuste do algoritmo de Metrópolis na determinação da temperatura crítica supercondutora de redes de junções Josephson. / Julhiana de Freitas Vargas. - 2022.  
63 f. : il.

Orientador: Valberto Pedruzzi Nascimento.  
Coorientador: Jorge Luis Gonzalez Alfonso.  
Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Espírito Santo, Centro de Ciências Exatas.

1. Junções Josephson. 2. Efeito Josephson. 3. Rede de Junções Josephson. 4. Mecânica Estatística. 5. Método de Monte Carlo. 6. Algoritmo de Metrópolis. I. Nascimento, Valberto Pedruzzi. II. Alfonso, Jorge Luis Gonzalez. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro de Ciências Exatas. IV. Título.

CDU: 53

---



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

---

**"Estudo da influência dos parâmetros de ajuste do algoritmo de Metropolis na determinação da temperatura crítica supercondutora de redes de junções Josephson"**

**Julhiana de Freitas Vargas**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Espírito Santo, por videoconferência, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada por:

Assinado de forma digital por  
Dalber Ruben Sanchez Candela  
Dados: 2022.08.09 16:35:49  
-03'00'

---

Prof. Dr. Dalber Ruben Sanchez Candela  
(UFF/RJ)

---

Prof. Dr. Valberto Pedruzzi Nascimento  
(Orientador - PPGFis)

---

Prof. Dr. Vinícius Cândido Mota  
(PPGFis/UFES)

---

Prof. Dr. Jorge Luis Gonzalez Alfonso  
(Coorientador - PPGFis/UFES)

Vitória-ES, 09 de agosto de 2022



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

**PROTOCOLO DE ASSINATURA**



O documento acima foi assinado digitalmente com senha eletrônica através do Protocolo Web, conforme Portaria UFES nº 1.269 de 30/08/2018, por  
VINICIUS CANDIDO MOTA - SIAPE 1969881  
Departamento de Física - DF/CCE  
Em 09/08/2022 às 23:29

Para verificar as assinaturas e visualizar o documento original acesse o link:  
<https://api.lepisma.ufes.br/arquivos-assinados/534157?tipoArquivo=O>



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

**PROTOCOLO DE ASSINATURA**



O documento acima foi assinado digitalmente com senha eletrônica através do Protocolo Web, conforme Portaria UFES nº 1.269 de 30/08/2018, por  
VALBERTO PEDRUZZI NASCIMENTO - SIAPE 1545401  
Departamento de Física - DF/CCE  
Em 10/08/2022 às 12:49

Para verificar as assinaturas e visualizar o documento original acesse o link:  
<https://api.lepisma.ufes.br/arquivos-assinados/534737?tipoArquivo=O>



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

**PROTOCOLO DE ASSINATURA**



O documento acima foi assinado digitalmente com senha eletrônica através do Protocolo Web, conforme Portaria UFES nº 1.269 de 30/08/2018, por  
JORGE LUIS GONZALEZ ALFONSO - SIAPE 1721147  
Departamento de Física - DF/CCE  
Em 11/08/2022 às 11:02

Para verificar as assinaturas e visualizar o documento original acesse o link:  
<https://api.lepisma.ufes.br/arquivos-assinados/535703?tipoArquivo=O>

# Agradecimentos

Primeiramente, agradeço a Deus, pois sem ele eu não teria conquistado o que eu conquistei nem chegado onde eu cheguei. Agradeço também meus pais, Robson e Maria das Dores que sempre me deram toda estrutura necessária para trilhar meu caminho e muito amor e carinho nas fases mais difíceis da minha vida. Agradeço minhas irmãs, Airiam e Valquiria e meu irmão Robson, por todo alívio de estresse e por me aguentarem nos meus momentos de ansiedade. E meu namorado Luccas, que me apoia desde a graduação até os dias de hoje, sempre me escutando e tranquilizando.

Agradeço todos meus amigos que trilharam essa longa jornada ao meu lado e meus professores orientadores, Valberto e Jorge, que tiraram parte do seu tempo para esclarecer minhas dúvidas e me orientar nessa fase, além de não desistirem de mim.

Agradeço a UFES, onde me graduei e agora estou terminando meu mestrado, por todo suporte e conhecimento adquirido ao longo dos anos e junto dela, agradeço todos os professores que passaram pela minha vida e fizeram parte da minha formação acadêmica. Agradeço por fim a CAPES, por fornecer apoio financeiro aos estudantes, condição essencial para que muitos possam se dedicar aos estudos.



*Deus é bom o tempo todo.*

# Resumo

O método estatístico de Monte Carlo via algoritmo de Metrópolis construído na plataforma MATLAB foi utilizado para estudar o comportamento do calor específico de redes de junções Josephson em função da temperatura e, com isso, definir suas temperaturas críticas de transição para o estado supercondutor. Em outras palavras, o algoritmo realiza uma sequência muito grande de transições aleatórias partindo de um microestado inicial qualquer da rede até atingir o estado de equilíbrio para energia do sistema que está correlacionado à sua temperatura crítica. Especificamente, a influência dos parâmetros de ajuste do algoritmo (tamanho de rede, número e tamanho do passo de Monte Carlo, número de simulações, entre outros) na determinação da temperatura crítica foi estudado sistematicamente. Para uma rede 4x4, o estado de equilíbrio não foi atingido com o número de simulações utilizado e não foi encontrado um pico do calor específico, impossibilitando a definição da temperatura crítica. A condição estável foi obtida para redes com tamanho de 7x7 a 14x14, onde as redes 9x9 e 10x10 forneceram resultados otimizados quando os parâmetros iniciais de entrada (PIE) definidos neste trabalho são utilizados. O estudo generalizado da influência dos parâmetros de ajuste foi realizado em uma rede 7x7 para minimizar os custos computacionais, para o qual encontrou-se um valor da temperatura crítica reduzida  $T_C = 0,494 \pm 0,004$  quando parâmetros otimizados de ajuste foram utilizados. Este tipo de estudo sobre as propriedades supercondutoras de sistemas compostos por redes de junções Josephson é essencial para o entendimento mais profundo destes dispositivos que operam em diversas aplicações tecnológicas, tais como, a fabricação de computadores ultrarrápidos e SQUID'S (*Superconducting Quantum Interference Device*) que conseguem medir campos magnéticos extremamente pequenos, como por exemplo, os campos gerados pelas correntes elétricas dos pulsos nervosos que acompanham as atividades do cérebro humano.

**Palavras-chave:** Junções Josephson, Efeito Josephson, Rede de Junções Josephson, Mecânica Estatística, Método de Monte Carlo, Algoritmo de Metrópolis.

# Abstract

The statistical method of Monte Carlo via Metropolis algorithm developed in the MATLAB platform was used to study the behavior of the specific heat of Josephson junction networks as a function of temperature and, consequently, to define their critical transition temperature for the superconducting state. In other words, the algorithm performs a very large sequence of random transitions starting from any initial micro-state of the network until reaching the system energy equilibrium state which is correlated to its critical temperature. Specifically, a systematic study was carried out to verify the influence of the algorithm's fit parameters (network size, number and size of Monte Carlo steps, number of simulations, among others) in determining the critical temperature. For a 4x4 network, the equilibrium state was not reached with the number of simulations used and a specific heat peak was not found, making it impossible to find the critical temperature. The steady condition was obtained for networks with sizes from 7x7 to 14x14, where the 9x9 and 10x10 networks provided optimized results when the initial input parameters (PIE) defined in this work were used. The generalized study of the influence of tuning parameters was carried out in a 7x7 network to minimize computational costs, for which a reduced critical temperature value  $T_C = 0.494 \pm 0.004$  was found when optimized tuning parameters were used. This type of study on the superconducting properties of systems composed of networks of Josephson junctions is essential for a deeper understanding of these devices able to act in several technological applications, such as the manufacture of ultrafast computers and SQUID'S (*Superconducting Quantum Interference Device*); the latter can measure extremely small magnetic fields, such as the fields generated by the electrical currents of the nerve pulses that accompany the activities of the human brain.

**Keywords:** Josephson Junction, Josephson Effect, Josephson Junction Network, Statistical Mechanics, Monte Carlo Method, Metropolis Algorithm

# Lista de ilustrações

Figura 1 – Resistência do Mercúrio medida por Onnes . . . . .	14
Figura 2 – Dependência entre temperatura crítica e campo crítico . . . . .	15
Figura 3 – Fotografia do chip processador de recozimento quântico D-Wave TwoX "Washington" montado e ligado por fio em um suporte de amostra. Este chip foi introduzido em 2015 e inclui 128.472 junções Josephson . . . . .	16
Figura 4 – Comportamento de um metal comum e um supercondutor em função da temperatura . . . . .	18
Figura 5 – Transição para fase supercondutora . . . . .	19
Figura 6 – Comportamento das linhas de campo para supercondutores do tipo I e II	22
Figura 7 – Junção Josephson esquematizada . . . . .	23
Figura 8 – SQUID . . . . .	28
Figura 9 – Circuito Supercondutor com duas Junções Josephson . . . . .	29
Figura 10 – Circuito Supercondutor com correntes aplicadas . . . . .	31
Figura 11 – Rede de Junções Josephson . . . . .	33
Figura 12 – Duas mechas particulares da figura (11) . . . . .	34
Figura 13 – Sistema não isolado, em contato térmico com outro reservatório . . . . .	38
Figura 14 – Diagrama Simplificado para o Algoritmo de Metrópolis . . . . .	45
Figura 15 – Rede 4x4 . . . . .	47
Figura 16 – $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM = 0.0175 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . . . . .	47
Figura 17 – Rede 7x7 - $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM = 0.0175 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	49
Figura 18 – Rede 9x9 - $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM = 0.0175 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	49
Figura 19 – Rede 10x10 - $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM = 0.0175 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	50
Figura 20 – Rede 14x14 - $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM = 0.0175 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	50
Figura 21 – Rede 31x31 - $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM = 0.0175 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	51

Figura 22 – Rede 7x7 - $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 1000$ , $stepM = 0.0175 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . . . . .	51
Figura 23 – Rede 7x7 - $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 100000$ , $stepM = 0.0175 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	52
Figura 24 – $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM =$ $0.0175 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 1000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	53
Figura 25 – $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM =$ $0.0175 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 25000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	53
Figura 26 – $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM =$ $0.0175 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 100000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	54
Figura 27 – $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM =$ $0.0175 * 5$ , $stepR = 10$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	55
Figura 28 – $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM =$ $0.0175 * 5$ , $stepR = 100$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	55
Figura 29 – $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM =$ $0.0001 * 5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . . . . .	56
Figura 30 – $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM = 0.01*5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . . . . .	56
Figura 31 – $c_v/k_B$ em função de $T/T_J$ para $numMCsteps = 50000$ , $stepM = 0.2*5$ , $stepR = 50$ , $tannealing = 50000$ e $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha). . . . .	57

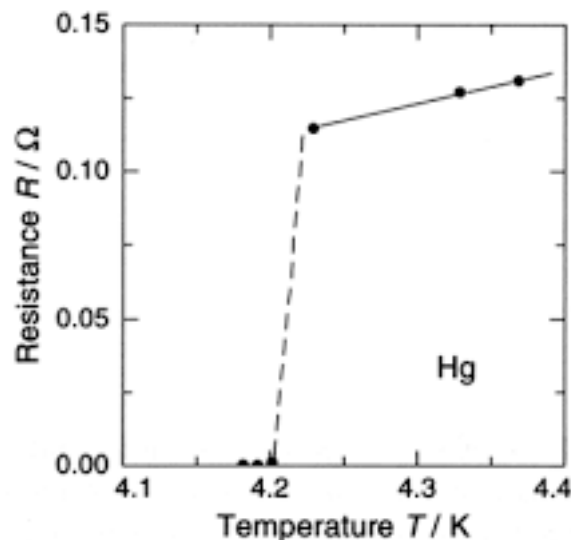
# Sumário

	<b>Introdução</b> . . . . .	<b>14</b>
<b>1</b>	<b>SUPERCONDUTORES E SUAS CARACTERÍSTICAS</b> . . . . .	<b>18</b>
<b>2</b>	<b>A JUNÇÃO JOSEPHSON</b> . . . . .	<b>23</b>
<b>2.1</b>	<b>O Efeito Josephson</b> . . . . .	<b>26</b>
<b>3</b>	<b>CIRCUITOS COM JUNÇÕES JOSEPHSON</b> . . . . .	<b>28</b>
<b>3.1</b>	<b>Correntes no Circuito</b> . . . . .	<b>31</b>
<b>3.2</b>	<b>Rede de Junções Josephson</b> . . . . .	<b>32</b>
<b>4</b>	<b>A MECÂNICA ESTATÍSTICA</b> . . . . .	<b>37</b>
<b>4.1</b>	<b>Conceitos Fundamentais</b> . . . . .	<b>37</b>
<b>4.2</b>	<b>Método de Monte Carlo</b> . . . . .	<b>40</b>
<b>4.3</b>	<b>O Algoritmo de Metrópolis</b> . . . . .	<b>41</b>
<b>5</b>	<b>RESULTADOS</b> . . . . .	<b>46</b>
<b>5.1</b>	<b>Rede 4x4</b> . . . . .	<b>46</b>
<b>5.2</b>	<b>Variação do tamanho de rede</b> . . . . .	<b>48</b>
<b>5.3</b>	<b>Rede 7x7 - variando numMCsteps e mantendo os outros parâmetros PIE constantes</b> . . . . .	<b>48</b>
<b>5.3.1</b>	<b>Rede 7x7 - variando tannealing e mantendo os outros parâmetros PIE constantes</b> . . . . .	<b>52</b>
<b>5.3.2</b>	<b>Rede 7x7 - variando stepR e mantendo os outros parâmetros PIE constantes</b>	<b>54</b>
<b>5.3.3</b>	<b>Rede 7x7 - variando stepM e mantendo os outros parâmetros PIE constantes</b>	<b>54</b>
<b>6</b>	<b>CONCLUSÃO</b> . . . . .	<b>58</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	<b>59</b>

# Introdução

As Junções Josephson são formadas por materiais supercondutores. Esses materiais possuem uma função importante na sociedade e estão presente no nosso dia a dia, entretanto sua descoberta não foi recente. Em 1911, o físico alemão Heike Kamerlingh Onnes começou a investigar as propriedades elétricas dos metais em temperaturas extremamente baixas (ONNES, 1991a). Já era de conhecimento comum que a resistência elétrica tendia a diminuir quando os metais eram resfriados abaixo da temperatura ambiente, entretanto não se sabia qual era o limite que a resistência conseguiria cair com o diminuir da temperatura. Usando esse fato, o grupo de Onnes queria testar como a resistência elétrica variava em função da temperatura numa amostra muito pura de mercúrio em forma de fio. Quando a amostra atingiu 4,2K a resistência sumiu e ainda havia uma corrente fluindo através do fio de mercúrio sem nada para impedir seu fluxo, vide figura (1). Segundo Onnes, o mercúrio havia passado para um novo estado o qual ele chamou de estado supercondutor (ONNES, 1991b). Essa descoberta teve grande importancia na comunidade científica devido ao seu potencial econômico e comercial. Um condutor elétrico sem resistência teoricamente poderia transportar correntes sem perdas, não importando a distância a ser percorrida. Devido a seus esforços, Onnes foi contemplado com o prêmio Nobel em 1913, entretanto, ele não conseguiu explicar as propriedades de um supercondutor satisfatoriamente.

Figura 1 – Resistência do Mercúrio medida por Onnes



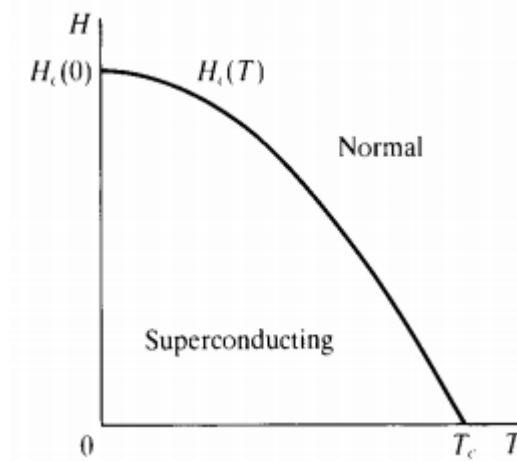
Fonte: High Temperature Superconductors: An Overview (KUMAR, 2019)

Anos após Onnes ter descoberto a supercondutividade, os cientistas Walther Meis-

Heinrich Heimeyer e Robert Ochsenfeld, em 1933, descobriram uma interessante propriedade magnética intrínseca nos supercondutores que recebeu o nome de efeito Meissner ([GINSBERG, 2018](#)). O efeito Meissner é caracterizado pela expulsão de linhas de um campo magnético externo do interior de um material que esteja no estado supercondutor. Em outras palavras, o campo magnético externo é blindado por correntes elétricas que surgem na superfície do supercondutor. Caso o campo comece a aumentar acima de um valor conhecido como campo magnético crítico  $H_C$ , as linhas de campo penetram o interior do material, e conseqüentemente o material perde sua supercondutividade e volta para seu estado normal. Esse efeito também é responsável pela levitação magnética que é que surge nos supercondutores ([SANTOS, 2015, v. 37, n. 2](#)).

O campo crítico está relacionado com a temperatura da forma ilustrada na figura (2). O valor do campo crítico para cada material cresce quando a temperatura aplicada decresce a curva campo crítico versus temperatura termina com uma inclinação finita em  $T_C$  com inclinação zero em  $T = 0K$ . Onde  $T_C$  é a temperatura crítica, ou seja, quando um material é resfriado abaixo dessa temperatura ele se torna supercondutor (Como havia sido descoberto para o Mercúrio por Onnes). A temperatura crítica é uma característica específica de cada metal.

Figura 2 – Dependência entre temperatura crítica e campo crítico



Fonte: ([TINKHAM, 2004](#))

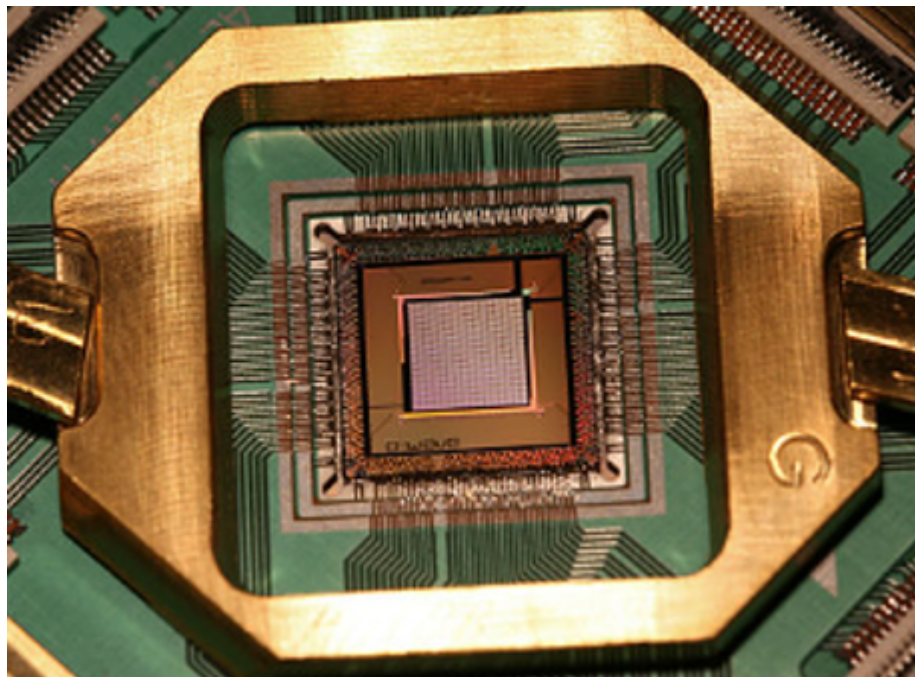
Outros cientistas envolvidos nessa área fizeram descobertas promissoras a respeito dos supercondutores: a teoria fenomenológica de Ginzburg-Landau obteve sucesso ao explicar as propriedades macroscópicas dos supercondutores ([HOFFMANN; TANG, 2012](#)) e Alexei Abrikosov mostrou que essa teoria predizia a divisão dos supercondutores em dois grupos distintos ([ABRIKOSOV, 1994](#)). Mas foi em 1957 que os cientistas americanos John Bardeen, Leon Cooper e Robert Schrieffer elaboraram um modelo que começava a descrever o comportamento real de uma classe de supercondutores. O modelo era baseado



nas ideias da mecânica quântica e sugeria que elétrons de um supercondutor tendiam a se condensar formando pares de Cooper, constituindo um estado quântico de baixa energia onde conseguiam fluir coletivamente e de forma coerente (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957). Os três ganharam o prêmio Nobel em 1972 e eles deram origem a chamada teoria BCS.

Baseando-se na teoria BCS, o físico inglês Brian David Josephson, verificou que uma corrente de elétrons tunelava entre dois materiais supercondutores fracamente ligados, separados por uma fina camada isolante (junção), esse fenômeno recebeu o nome de efeito Josephson (JOSEPHSON, 1962) que permite mostrar consequências da mecânica quântica em escala macroscópica. Devido à emergência das propriedades supercondutoras a busca por novos materiais supercondutores com "alta" temperatura crítica aumentou muito no século passado e ainda atraem a atenção da comunidade científica.

Figura 3 – Fotografia do chip processador de recozimento quântico D-Wave TwoX "Washington" montado e ligado por fio em um suporte de amostra. Este chip foi introduzido em 2015 e inclui 128.472 junções Josephson



Fonte: <https://stringfixer.com/pt/Josephsonjunctioncount>

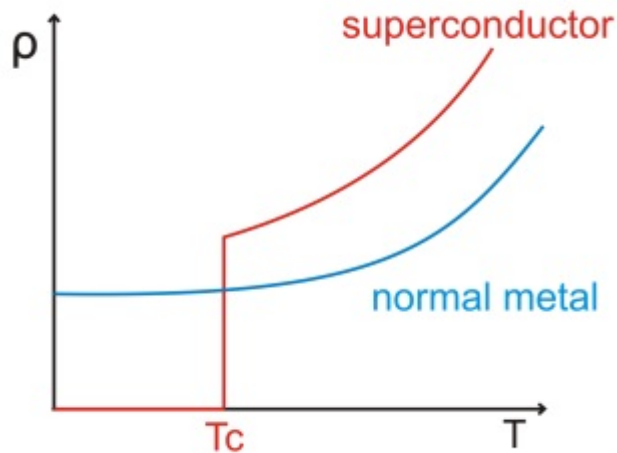
Neste trabalho, estudaremos dispositivos contendo redes de Junções Josephson, como por exemplo na figura (3), que podem ser utilizadas como qubits supercondutores (que são uma alternativa aos bits clássicos, usados na computação) (PIVETTA, 2012). Especificamente, simularemos a variação do calor específico dessas redes (quadradas e de diversas dimensões) usando o Método de Monte Carlo (MARKS, 2016) via o algoritmo de Metrópolis (METROPOLIS, 1987), para obter as sua temperatura crítica para diversas

combinações de parâmetros variáveis do programa.

# 1 Supercondutores e suas características

Os materiais supercondutores são capazes de manter a corrente que os atravessa fluindo mesmo sem a aplicação de nenhuma tensão (JOSEPHSON, 1974). Um supercondutor é diferente de um metal comum hipotético com condutividade infinita, pois apesar de um metal no estado supercondutor apresentar uma condutividade perfeita, ao ser resfriado na presença de um campo magnético, ele expulsa esse fluxo, enquanto o metal comum aprisiona esse fluxo magnético dentro dele. Além disso, um metal comum mesmo à temperaturas muito baixas ( $\approx 0K$ ) continua apresentando uma resistência, enquanto que para um material supercondutor essa resistência cai pra zero nas mesmas condições, como ilustrado na figura (4). Dessa forma, um supercondutor deve possuir diamagnetismo e condutividade perfeita (KITTEL; MCEUEN, 2018).

Figura 4 – Comportamento de um metal comum e um supercondutor em função da temperatura

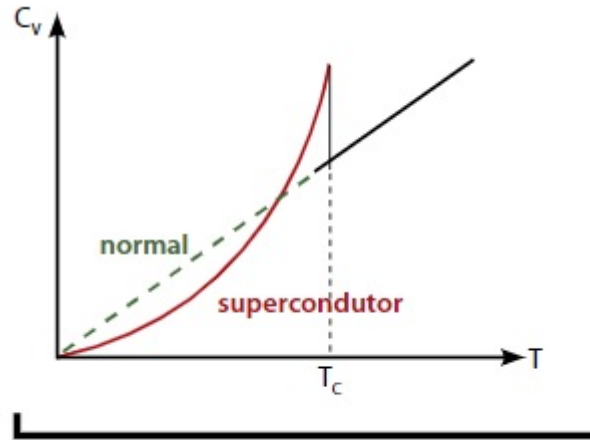


Fonte: (ASHCROFT et al., 1976)

A transição para fase supercondutora pode ser percebida na figura (5), que ilustra a contribuição dos elétrons de condução ao calor específico de um metal supercondutor, comparada com o calor específico eletrônico do mesmo metal no estado normal. A anomalia observada na temperatura crítica indica a ocorrência de uma transição de fase envolvendo o sistema de elétrons de condução do material.

Em 1935 os irmãos F. London e H. London formularam um modelo, baseando-se no modelo de dois fluidos (OLIVEIRA; JESUS, 2005). Esse modelo considera que somente

Figura 5 – Transição para fase supercondutora



Fonte: (PUREUR, 2012)

uma fração dos elétrons se encontra no estado supercondutor. Sendo:

$$n = n_n + n_s \quad (1.1)$$

Onde  $n$  é a densidade total de elétrons,  $n_n$  densidade de elétrons normais e  $n_s$  a densidade de elétrons no estado supercondutor. Essas quantidades claramente dependem da temperatura, logo,  $n_s(T_c) = 0$  (a supercondutividade desaparece na temperatura crítica) e  $n_s(0) = n$  (todos os elétrons são supercondutores a 0 K). Dessa forma, a corrente supercondutora será dada por:

$$\vec{J}_s = -n_s e \vec{v}_s \quad (1.2)$$

E  $\vec{v}_s$  é a velocidade dos elétrons supercondutores. Usando a segunda lei de Newton, é possível escrever:

$$m \frac{\partial \vec{v}_s}{\partial t} = \vec{F} = -e \vec{E}$$

$$\frac{\partial \vec{v}_s}{\partial t} = -\frac{1}{n_s e} \frac{\partial \vec{J}_s}{\partial t}$$

Se  $\lambda_L$ , profundidade de penetração de London (profundidade a qual um campo magnético externo tende a penetrar em um supercondutor), for escrito da seguinte forma:

$$\lambda_L = \frac{m}{n_s e^2}$$

$$\vec{E} = \frac{\partial}{\partial t}(\lambda_L \vec{J}_s) \quad (1.3)$$

$\vec{E}$  é o campo elétrico sentido pelos elétrons supercondutores (campo elétrico dentro do material), (1.3) é conhecida como a primeira equação de London e descreve a condutividade perfeita, uma vez que qualquer campo elétrico acelera os elétrons supercondutores, ao invés de manter sua velocidade contra a resistência, como descrito pela lei de Ohm. Esse campo depende da posição  $\vec{r}$  e deve satisfazer a lei de Faraday:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.4)$$

Usando a equação (1.3) na (1.4):

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \left( \frac{\partial}{\partial t}(\lambda_L \vec{J}_s) \right) &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \frac{\partial}{\partial t}[\vec{\nabla} \times (\lambda_L \vec{J}_s) + \vec{B}] &= 0 \end{aligned} \quad (1.5)$$

Observando a equação (1.5) é fácil perceber que a quantidade entre colchetes se mantém constante com o tempo. Os irmãos London perceberam que era possível explicar o efeito Meissner escolhendo a solução particular:

$$\vec{\nabla} \times (\lambda_L \vec{J}_s) + \vec{B} = 0 \quad (1.6)$$

Ou:  $\vec{B} = -\vec{\nabla} \times (\lambda_L \vec{J}_s)$ , mais conhecida como segunda equação de London. A solução geral  $\vec{B} + \lambda_L \vec{\nabla} \times \vec{J}_s = \text{constante}$ , representa o fato de que o fluxo magnético em um material, sem resistência elétrica, se conserva (LONDON; LONDON, 1935). A solução imposta pelos irmãos London, impõe que o fluxo magnético seja sempre zero e essa hipótese já inclui o efeito Meissner. Um supercondutor com pouco ou nenhum campo magnético em seu interior está no estado de Meissner e perde rapidamente esse estado quando o campo magnético externo atinge um valor crítico.

Apesar de os irmãos London terem proposto esta teoria que explicava certos aspectos dos supercondutores, as propriedades destes materiais ainda não possuíam uma explicação microscópica satisfatória, ou seja, ainda não havia uma teoria quântica até quase 50 anos após a sua descoberta. Foi em 1957 que Bardeen, Cooper e Schrieffer propuseram uma teoria microscópica para os supercondutores (SCHRIEFFER, 1964). A teoria BCS explica o que acontece quando um elétron se move em um material supercondutor: Um

elétron que se move através de um condutor atrairá cargas positivas próximas na estrutura, esta deformação faz com que outro elétron, com spin oposto, se mova em uma região com densidade de carga positiva mais elevada, os dois elétrons são mantidos unidos com uma energia de ligação. Se esta energia de ligação é mais elevada do que a energia fornecida por impulsos dos átomos de oscilação no condutor, então os pares de elétrons conseguem se manter juntos e resistem aos impulsos, não experimentando resistência. Em altas temperaturas, a agitação térmica é tão forte que um par de Cooper não consegue se estabilizar. Analisando o acoplamento entre os elétrons e fônons, a teoria BCS mostra que os pares de Cooper tem energia ligeiramente inferior a energia dos elétrons individuais.

A função de onda de um par de Cooper pode ser escrita da forma:

$$\psi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \frac{1}{L^3} \sum_k g(\vec{k}) e^{i[\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)]} \quad (1.7)$$

Onde  $|g(\vec{k})|^2$  é a probabilidade de o par ser encontrado no estado  $(\vec{k} \uparrow, -\vec{k} \downarrow)$ . Perceba que essa função possui a forma de um pacote de ondas que descreve o movimento de uma partícula livre. É como se os pares de Cooper formassem uma espécie de "gás de partículas livres" dentro do supercondutor. A teoria BCS mostra que no estado fundamental de um supercondutor todos os pares de Cooper ocupam o mesmo estado de energia (MEYERS; MYERS, 1997).

Alguns resultados importantes foram deduzidos da teoria BCS como, a temperatura crítica de um supercondutor (OLIVEIRA; JESUS, 2005):

$$k_B T_C = 1, 14 \hbar \omega_D e^{-1/g(E_F)V_0} \quad (1.8)$$

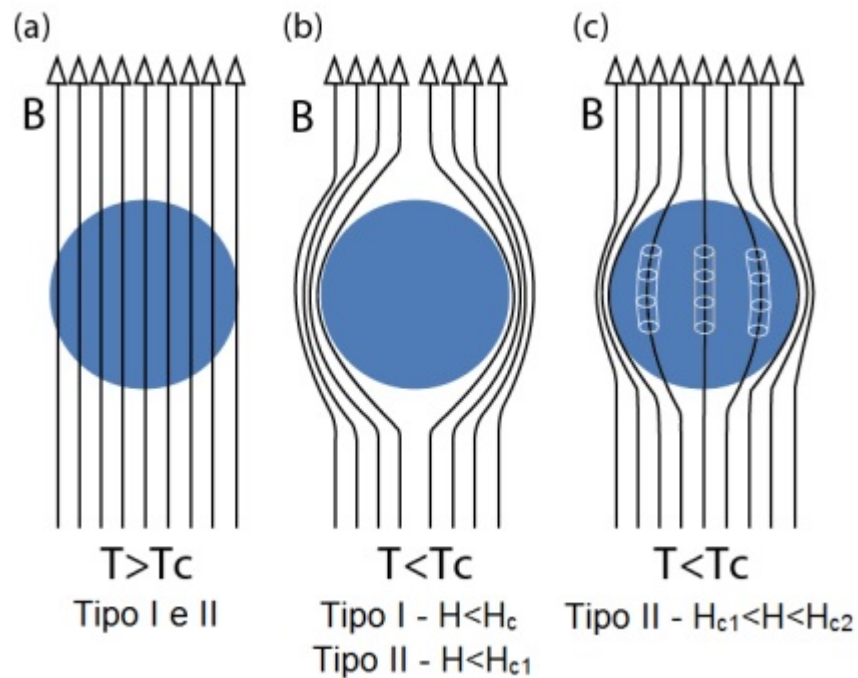
Onde  $\omega_D \approx 10^{-13} s^{-1}$  é a frequência de Debye,  $V_0$  é o potencial efetivo atrativo entre os elétrons, e  $g(E_F)$  é a densidade de estados de elétrons que se encontram no nível de Fermi. E o calor específico para os elétrons supercondutores:

$$\frac{C_S}{\gamma T_C} = 2, 37 \left( \frac{T}{T_C} \right)^{3/2} e^{-1,76 T_C/T} \quad (1.9)$$

Por fim, é importante ressaltar que existem dois tipos de supercondutores. Os supercondutores do tipo I, são constituídos de um único elemento como por exemplo: Hg, Al e Pb. Para esse tipo de supercondutor o efeito Meissner é completo, ou seja, o fluxo magnético é totalmente expulso do interior da amostra. Já os supercondutores do tipo II são formados por elementos compostos: LaBaCuO e TlBaCuO e são considerados supercondutores de "altas" temperaturas. Nesse tipo de supercondutor nós temos os estados mistos vide figura (6), ou seja, para campos menores que  $H_1$  o efeito está presente, para campos entre  $H_1$  e  $H_2$  o estado de vórtices está presente, onde em localizações

pontuais do material temos a penetração de linhas de campo magnético sem quebrar a supercondutividade, e para campos maiores que  $H_2$  a supercondutividade deixa de existir.

Figura 6 – Comportamento das linhas de campo para supercondutores do tipo I e II



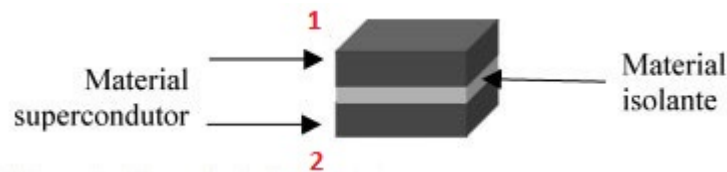
Fonte: (DIAS, 2010)

Supercondutores do tipo II não perdem facilmente o estado supercondutor pelo campo magnético externo. Sua transição de um estado supercondutor para um estado normal é gradual, diferente dos supercondutores de tipo I onde essa transição ocorre de forma abrupta. Devido a esses fatos, supercondutores do tipo II possuem aplicações mais amplas, visto que não é necessário uma temperatura tão baixa para atingir seu estado supercondutor, quanto para os do tipo I e ele também é menos sensível a campos magnéticos.

## 2 A Junção Josephson

Uma junção Josephson é formada por dois supercondutores conectados por uma fina camada de material isolante. A barreira isolante deve ser fina o suficiente para permitir que o tunelamento de pares de Cooper. Foi Josephson quem percebeu e descreveu esse comportamento enquanto observava essa configuração, por isso, a junção recebe seu nome. Além disso, a junção é o elemento chave para a construção de qubits (que são essenciais para a computação quântica na parte de processamento e armazenamento de dados) e está ilustrada logo abaixo.

Figura 7 – Junção Josephson esquematizada



Fonte: (COSTA MARCONI B.S. E PAVÃO, 2012)

Considerando o sistema acima, podemos definir o número de pares de Cooper como  $n_1$  de um lado da junção e  $n_2$  do outro lado da junção, e as fases quânticas  $\varphi_1$  e  $\varphi_2$  referentes às funções de onda da parte de cima e da parte de baixo da junção. Essas funções de onda são dadas por (FEYNMAN; LEIGHTON; SANDS, 2015):

$$\psi_1 = \sqrt{n_1} e^{i\varphi_1} \quad (2.1)$$

$$\psi_2 = \sqrt{n_2} e^{i\varphi_2} \quad (2.2)$$

De modo que o efeito de tunelamento dos pares de Cooper ocasiona uma diferença de fase devido à superposição das funções de onda dos metais supercondutores que constituem o sistema.

Agora vamos deduzir as equações Josephson para dois supercondutores em forma de paralelepípedos separados por uma junção plana. A espessura do isolante é suficiente para isolar fracamente os dois supercondutores, de modo que o zero do potencial fique no meio da barreira isolante. Dessa forma, o supercondutor 1, por exemplo, estará no potencial  $V_1 = -\frac{V}{2}$  com energia potencial dos pares de Cooper  $eV$ . O supercondutor 2,



estará no potencial  $V_2 = \frac{V}{2}$  com energia dos pares de Cooper igual a  $-eV$ . As Equações de Schrodinger para os transportadores de cargas nos dois supercondutores são:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = (-eV_1 + K)\psi_1 \quad (2.3)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = (-eV_2 + K)\psi_2 \quad (2.4)$$

Onde  $K$  é uma constante de acoplamento para as funções de onda através da barreira. Sendo assim, podemos escrever as equações acima da forma:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \frac{eV}{2}\psi_1 + K\psi_2 \quad (2.5)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = -\frac{eV}{2}\psi_2 + K\psi_1 \quad (2.6)$$

Que são equações padrão para dois estados quânticos acoplados. Usando as seguintes definições de  $\psi_1$  e  $\psi_2$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( \sqrt{n_1} e^{i\varphi_1} \right) = \frac{eV}{2} \left( \sqrt{n_1} e^{i\varphi_1} \right) + K \sqrt{n_2} e^{i\varphi_2}$$

$$i\hbar \left[ \sqrt{n_1} e^{i\varphi_1} \left( \frac{\dot{n}_1}{2n_1} + i\dot{\varphi}_1 \right) \right] = \frac{eV}{2} \sqrt{n_1} e^{i\varphi_1} + K \sqrt{n_2} e^{i\varphi_2}$$

Que pode ser escrita da forma:

$$i\hbar \left( \frac{\dot{n}_1}{2n_1} + i\dot{\varphi}_1 \right) = \frac{eV}{2} + K \sqrt{\frac{n_2}{n_1}} e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)}$$

Considerando  $\varphi_2 - \varphi_1 = \delta$ :

$$i\hbar \frac{\dot{n}_1}{2n_1} - \hbar \dot{\varphi}_1 = \frac{eV}{2} + K \sqrt{\frac{n_2}{n_1}} (\cos \delta + i \sin \delta)$$

Igualando as partes reais e as partes imaginárias, é possível obter:

$$\begin{aligned} \hbar \frac{\dot{n}_1}{n_1} &= 2K \sqrt{\frac{n_2}{n_1}} \sin \delta \\ \dot{n}_1 &= \frac{2K}{\hbar} \sqrt{n_1 n_2} \sin \delta \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \hbar\dot{\varphi}_1 &= -\frac{eV}{2} - K\sqrt{\frac{n_2}{n_1}} \cos \delta \\ \dot{\varphi}_1 &= -\frac{eV}{2\hbar} - \frac{K}{\hbar}\sqrt{\frac{n_2}{n_1}} \cos \delta \end{aligned} \quad (2.8)$$

Fazendo os mesmos passos, é possível chegar nas equações correspondentes para  $\dot{n}_2$  e  $\dot{\varphi}_2$ :

$$\dot{n}_2 = -\frac{2K}{\hbar}\sqrt{n_1 n_2} \sin \delta \quad (2.9)$$

$$\dot{\varphi}_2 = \frac{eV}{2\hbar} - \frac{K}{\hbar}\sqrt{\frac{n_1}{n_2}} \cos \delta \quad (2.10)$$

Comparando as equações (2.7) e (2.9), conclui-se que  $\dot{n}_1 = -\dot{n}_2$ . Essas equações nos dizem como as densidades deveriam começar a variar e descrevem o tipo de corrente que começaria a fluir. Essa corrente do lado 1 para o lado 2 seria  $\dot{n}_1$ :

$$I_a = \frac{2K}{\hbar}\sqrt{n_1 n_2} \sin \delta \quad (2.11)$$

Como os dois lados da junção estão conectados por fios a uma bateria, a corrente que flui vai carregar a região 2 (ou descarregar a região 1), pois correntes irão fluir para deixar o potencial constante. Neste caso,  $n_1$  e  $n_2$  ficam de fato constantes e iguais a  $n_0$ , assim, é possível escrever  $\frac{2K}{\hbar}n_0 = I_C$  e dessa forma, a equação (2.11) fica:

$$I_a = I_C \sin \delta \quad (2.12)$$

A corrente crítica  $I_C$  é a medida de quão fortemente as fases dos dois supercondutores estão acopladas e representa a maior corrente que pode atravessar a junção sem que ela perca a sua supercondutividade. A respeito das equações (2.8) e (2.10), podemos calcular o  $\dot{\delta} = \dot{\varphi}_2 - \dot{\varphi}_1$ :

$$\frac{d\delta}{dt} = \frac{eV}{\hbar} = \frac{2eV}{\hbar} \quad (2.13)$$

Visto que a carga de um par de Cooper é  $2e$ , de forma mais geral, podemos escrever a equação (2.13) da forma:

$$\begin{aligned} \int_0^t d\delta &= \frac{2e}{\hbar} \int V(t) dt \\ \delta(t) &= \delta_0 + \frac{2e}{\hbar} \int V(t) dt \end{aligned} \quad (2.14)$$

Então as equações (2.12) e (2.14), nos dão a teoria geral da junção Josephson. As junções Josephson podem ser usadas entre outras aplicações em voltímetros ultra-sensíveis e magnetômetros. Esse efeito que foi descrito acima tem o nome de **Efeito Josephson**.

## 2.1 O Efeito Josephson

Como foi visto anteriormente o Efeito Josephson ocorre quando uma supercorrente de tunelamento aparece através de uma junção isolante que separa dois supercondutores. Um fato interessante a respeito desse efeito, é que tal corrente existe mesmo quando não há campo elétrico aplicado. O Físico britânico Brian David Josephson, previu a existência do efeito em 1962 (JOSEPHSON, 1962) e um ano mais tarde ele foi comprovado por Anderson e Rowell (ANDERSON; ROWELL, 1963).

Por simplicidade a discussão anterior foi realizada em termos da diferença de fase  $\delta$ . Entretanto,  $\delta$  não é uma quantidade invariante por calibre e não possui valor único para uma dada situação física, por isso, não pode, no geral, determinar a corrente  $I_a$ , a qual é uma quantidade física invariante por calibre bem definida. Essa dificuldade pode ser resolvida substituindo  $\delta$  pela diferença de fase invariante por calibre  $\gamma$  definida por:

$$\gamma = (\varphi_2 - \varphi_1) - \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_A^B \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (2.15)$$

Onde  $\vec{A}$  representa o vetor potencial associado ao campo magnético ( $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ ). Então a equação (2.12) pode ser escrita da forma:

$$I_a = I_C \sin(\gamma) \quad (2.16)$$

Essa equação representa a corrente elétrica na junção, que agora é função de uma diferença de fase invariante por calibre. Isto é importante, visto que a invariância de calibre da eletrodinâmica implica na conservação de carga. Podemos também escrever a diferença de potencial na junção em função da diferença de fase invariante por calibre:

$$V = \frac{\hbar}{2e} \frac{d\gamma}{dt} \quad (2.17)$$

A introdução de uma diferença de fase invariante por calibre é a chave para trabalhar os efeitos de um campo magnético, que não pode ser tratado sem a introdução do potencial vetor  $\vec{A}$ . Enquanto não houver campo magnético presente,  $\vec{A}$  pode ser tomado como zero, então  $\delta$  e  $\gamma$  podem ser usados sem diferença.

O efeito Josephson de Corrente Contínua (DC) (CHEN; TODD; KIM, 1972) é descrito pela equação (2.16), já o efeito Josephson de Corrente Alternada (AC) (MCCUMBER, 1968) ocorre quando uma corrente alternada de frequência  $\nu = \frac{2eV}{\hbar}$  oscila entre dois

metais supercondutores, caso seja aplicada uma tensão  $V$  na junção. O grande atrativo da junção é que ela pode ser usada como um indutor não linear. Ao derivar a equação (2.16) (SILVA, 2017):

$$\begin{aligned}\frac{dI_a}{dt} &= I_C \cos(\gamma) \frac{d\gamma}{dt} \\ \dot{I}_a &= \frac{2eV}{\hbar} I_C \cos(\gamma)\end{aligned}\quad (2.18)$$

A indutância é a tendência de um condutor elétrico se opor a uma mudança na corrente elétrica que flui por ele. A dependência de  $\dot{I}_a$  com o potencial  $V$  caracteriza a equação obtida anteriormente como um indutor, que pode ser definido fazendo  $V = L_J \dot{I}_a$  :

$$L_J = \frac{\hbar}{2eI_C \cos(\gamma)} \quad (2.19)$$

Sendo  $\Phi_0 = \frac{\hbar}{2e}$ , o quantum de fluxo magnético (SCHUSTER, 2007).

$$L_J = \frac{\Phi_0}{2\pi I_C \cos(\gamma)} \quad (2.20)$$

Outro parâmetro importante da junção é a energia Josephson, que representa o máximo da energia potencial da junção. É a energia necessária para manter a junção acoplada e pode ser obtida através da expressão:

$$U = \int_0^t V(t) i(t) dt$$

$$U = \int_0^t V(t) I_a(t) dt = \int_0^t \frac{\hbar}{2e} \frac{d\gamma}{dt} I_C \sin(\gamma) dt \quad (2.21)$$

$$U = \frac{\hbar I_C}{2e} \int_0^{\gamma(t)} \sin(\gamma) d\gamma = \frac{\hbar I_C}{2e} (1 - \cos(\gamma)) \quad (2.22)$$

$$U = \frac{\Phi_0 I_C}{2\pi} (1 - \cos(\gamma)) \quad (2.23)$$

Então, a energia de acoplamento Josephson para uma única junção é dada por:

$$U = -\frac{\Phi_0 I_C}{2\pi} \cos(\gamma) \quad (2.24)$$

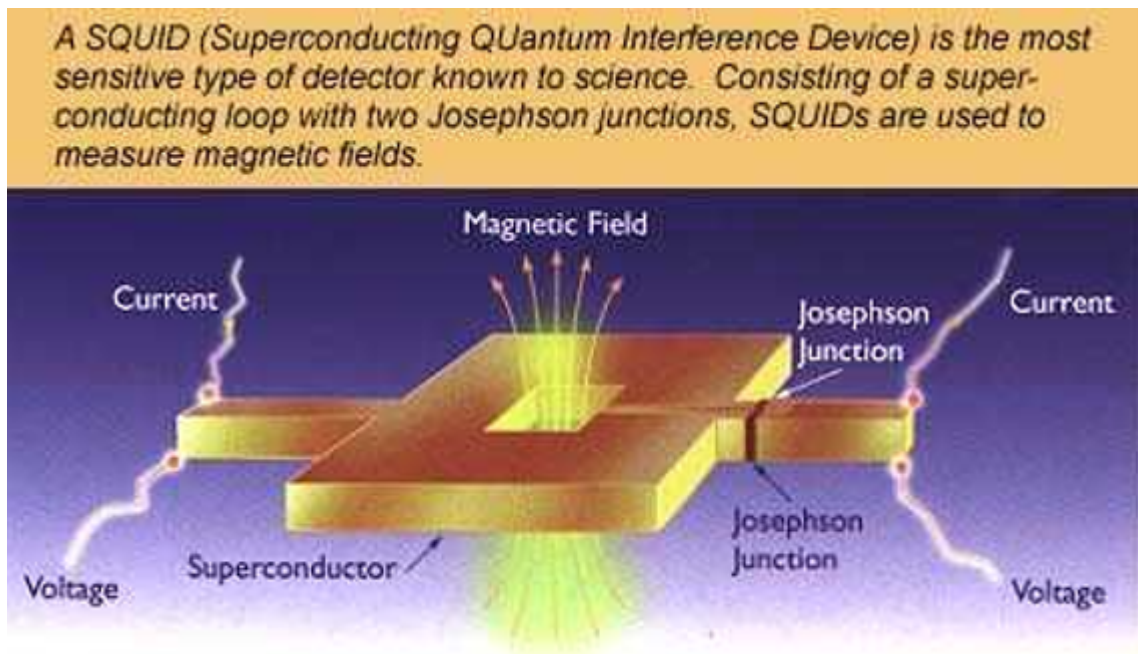
Sabendo as características básicas de uma junção Josephson, fica mais claro estudar junções acopladas (**circuitos com junções Josephson**) e entender como elas funcionarão em conjunto.

### 3 Circuitos com Junções Josephson

Tendo em vista do que é um dispositivo supercondutor e como ele funciona, é possível montar circuitos usando esses dispositivos a fim de se obter um circuito supercondutor, onde suas propriedades estarão ampliadas devido ao fato de que estarão sendo aplicadas em conjunto.

Nesses circuitos serão usados SQUIDS (Superconducting Quantum Interference Device - Dispositivo Supercondutor de Interferência Quântica (WEINSTOCK, 2012)) que são sensores de fluxo magnético bastante sensíveis e combinam dois fenômenos físicos: a quantização de fluxo em um anel supercondutor e o efeito Josephson (GALLOP, 2017). SQUIDS são sensores versáteis capazes de medir qualquer quantidade física que possa ser convertida em fluxo magnético, como campo magnético, gradiente de campo magnético, susceptibilidade magnética, corrente, tensão ou deslocamento mecânico. Sua sensibilidade o torna essencial em algumas aplicações, como na medição de sinais magnéticos gerados no cérebro, medição de campos geomagnéticos flutuantes em áreas remotas para a detecção de ondas gravitacionais e observação de ruído de spin em um conjunto de núcleos magnéticos (CLARKE; BRAGINSKI, 2006) e está ilustrado na figura (8).

Figura 8 – SQUID



Fonte: <http://www.if.ufrgs.br/tex/fis01043/20012/Carolina/aplicac.html>

Considere um dispositivo formado por um filme supercondutor contendo 2 junções Josephson como mostrado na figura (9). Essa estrutura representa a essência de sensores

SQUID.

Figura 9 – Circuito Supercondutor com duas Junções Josephson

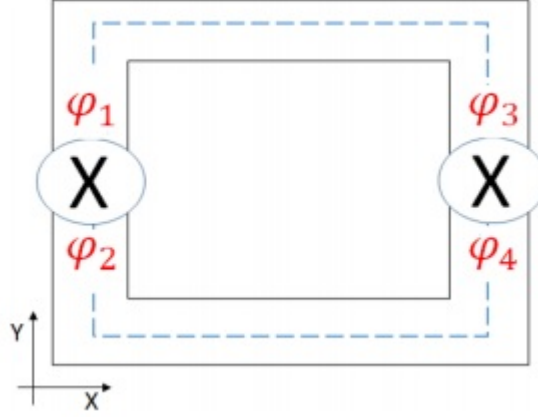


Figura cedida por Jorge Gonzalez

Um campo magnético externo está sendo aplicado na base do circuito da figura (9). As duas junções Josephson são identificadas pelo símbolo  $X$  e as fases no extremo das junções estão nomeadas com a letra grega  $\varphi$ . O fluxo magnético atravessando a área delimitada pelo caminho fechado  $C$ , pode ser calculado usando  $\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{l}$  (ANTON; BIVENS; DAVIS, 2014):

$$\Phi = \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_1^3 \vec{A} \cdot d\vec{l} + \int_3^4 \vec{A} \cdot d\vec{l} + \int_4^2 \vec{A} \cdot d\vec{l} + \int_2^1 \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (3.1)$$

Por outro lado, o momento generalizado para uma partícula com carga  $2e$  (par de Cooper) na presença de um campo magnético é dado por (OLIVEIRA; JESUS, 2005):

$$\vec{p} = \hbar(\vec{\nabla}\varphi - \frac{2\pi}{\Phi_0}\vec{A}) \quad (3.2)$$

Onde,  $\varphi$  é a fase da onda e  $\vec{A}$  é o vetor potencial associado ao campo aplicado. É possível assumir que não há corrente de “super elétrons “ dentro do circuito e então, teremos ao longo do caminho  $C$  a condição  $\vec{p} = 0$ :

$$\vec{\nabla}\varphi = \frac{2\pi}{\Phi_0}\vec{A} \quad (3.3)$$

Usando esses fatos, a equação (3.1) pode ser escrita como:

$$\Phi = \frac{\Phi_0}{2\pi} \int_1^3 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} + \int_3^4 \vec{A} \cdot d\vec{l} + \frac{\Phi_0}{2\pi} \int_4^2 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} + \int_2^1 \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (3.4)$$

E sabendo que uma integral de caminho pode ser escrita da forma:

$$\oint_C \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} = \int_1^3 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} + \int_3^4 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} + \int_4^2 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} + \int_2^1 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} \quad (3.5)$$

É possível escrever:

$$\int_1^3 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} + \int_4^2 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} = \oint_C \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} - \int_3^4 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} - \int_2^1 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} \quad (3.6)$$

Substituindo (3.6) em (3.4):

$$\Phi = \frac{\Phi_0}{2\pi} \left[ \oint_C \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} - \int_3^4 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} - \int_2^1 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} \right] + \int_3^4 \vec{A} \cdot d\vec{l} + \int_2^1 \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (3.7)$$

E reescrevendo esta equação de modo a agrupar mais claramente as expressões:

$$\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0} = \oint_C \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} - \int_3^4 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} - \int_2^1 \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} + \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_3^4 \vec{A} \cdot d\vec{l} + \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_2^1 \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (3.8)$$

$$\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0} = \oint_C \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} - (\varphi_4 - \varphi_3) - (\varphi_1 - \varphi_2) + \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_3^4 \vec{A} \cdot d\vec{l} + \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_2^1 \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (3.9)$$

Agora, usando a definição de diferença de fase dada pela equação (2.15), é possível definir a diferença de fase na junção da esquerda ( $\gamma_L$ ) e da direita ( $\gamma_R$ ):

$$\gamma_L = (\varphi_1 - \varphi_2) - \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_2^1 \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (3.10)$$

$$\gamma_R = (\varphi_4 - \varphi_3) - \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_3^4 \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (3.11)$$

E usando essas definições, a equação (3.9) fica:

$$\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0} = \oint_C \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} + \gamma_R - \gamma_L \quad (3.12)$$

A função de onda deve possuir um valor único, portanto, a diferença de fase ao longo do caminho fechado deve ser um valor dado por:

$$\Delta\varphi = \oint_C \vec{\nabla}\varphi \cdot d\vec{l} = 2\pi n \quad (3.13)$$

E assim, a equação (3.12), finalmente pode ser escrita como:

$$\gamma_L - \gamma_R = 2\pi \left( n - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \quad (3.14)$$

Para o caso de três junções, a mesma análise pode ser realizada, resultando na equação generalizada:

$$\sum \gamma_i = 2\pi \left( n - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \quad (3.15)$$

A trajetória da corrente tem uma direção bem definida (sentido horário). O sinal da fase invariante por calibre na soma acima depende da direção que a junção é atravessada, considerando o eixo de referência. A configuração mais simples é a de duas junções acopladas, no entanto a expressão acima serve para estudarmos um número maior de junções. Antes de aumentarmos esse número, existem ainda outras características do sistema que devem ser avaliadas, como aplicação de um fluxo magnético externo nesse circuito e como as se modificam nesse caso.

### 3.1 Correntes no Circuito

Para estudarmos o comportamento de correntes no circuito, será usado o mesmo circuito da figura (9), entretanto, agora será introduzido um fluxo magnético externo que está sendo aplicado perpendicularmente ao plano dessa figura. Como vimos pelo efeito Meissner, um supercondutor tende a expulsar o fluxo magnético de seu interior, para que isso ocorra, irá surgir uma corrente induzida no circuito em uma direção tal que seja oposta a corrente gerada pelo fluxo magnético, e esta corrente tentará blindar o fluxo magnético externo.

Figura 10 – Circuito Supercondutor com correntes aplicadas

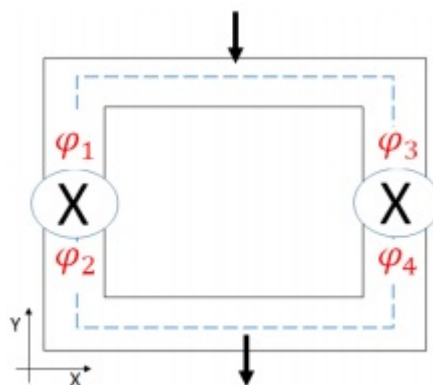


Figura cedida por Jorge Gonzalez

Para que isso ocorra, é necessário que a corrente de blindagem esteja no sentido anti-horário. Então, a corrente de blindagem  $I_s$  atravessando ambas junções pode ser expressa pela



seguinte equação:

$$I_S = \frac{I_{CR}}{2} \sin(\gamma_R) - \frac{I_{CL}}{2} \sin(\gamma_L) \quad (3.16)$$

Onde os sinais também tem relação com o eixo adotado. Na equação acima, os termos  $I_{CL}$  e  $I_{CR}$  são as correntes críticas na junção da esquerda e da direita respectivamente. Como explicado, a corrente circulando o loop gera um fluxo magnético interno  $\Phi_S$  tal que  $\Phi_S = LI$ , onde  $L$  é a indutância do loop. O conjunto de equações controlando a dinâmica do sistema mostrado na figura (10) é dado por:

$$\gamma_L - \gamma_R = 2\pi \left( n - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \quad (3.17)$$

$$I_S = -\frac{I_{CL}}{2} \sin(\gamma_L) + \frac{I_{CR}}{2} \sin(\gamma_R) \quad (3.18)$$

$$\Phi = \Phi_{ext} + LI_S \quad (3.19)$$

Note que o fluxo das equações acima é a soma de duas contribuições: uma do campo externo e a outra derivada da corrente de blindagem. Além disso, uma corrente de pares de Cooper pode atravessar um circuito supercondutor. Considerando que as setas da figura (10) são as correntes entrando e saindo do sistema (a corrente entra no topo do circuito e sai na base dele). Essa situação resulta em outra equação que leva em consideração a conservação de carga no circuito:

$$I_a = -I_L \sin(\gamma_L) - I_R \sin(\gamma_R) \quad (3.20)$$

Finalmente, podemos perceber que para cada tamanho de rede, cada loop resultará em um conjunto particular de equações. Quanto maior a rede, mais equações estarão presentes e o sistema de equações a ser resolvido se tornará mais complicado. Neste caso, o sistema envolve as equações (3.17), (3.18), (3.19) e (3.20)), onde cada equação (para uma mecha particular) pode incluir diferentes parâmetros.

## 3.2 Rede de Junções Josephson

Como foi visto anteriormente, quando temos duas ou mais junções ligadas entre si, podemos chamar essa configuração de circuitos supercondutores. Para fins de generalização, vamos agora estudar uma rede de junções com mais de duas junções interligadas, afim de observar como as equações para esse tamanho de rede se comportam e qual a complexidade do problema abordado.

A importância de estudar esse tipo de circuito está no fato de que um importante constituinte deles são os qubits. A área da física que estuda os qubits progrediu bastante nos últimos anos. Um qubit é uma unidade de informação quântica, que pode ser descrita por um vetor de estado em um sistema quântico de dois níveis. Ele possui algumas similaridades com o bit clássico (pode possuir dois valores: 0 ou 1), entretanto o qubit pode ser 0 ou 1 ou uma superposição dos dois. Qubits são utilizados na Computação Quântica que é a ciência que estuda as aplicações das teorias e propriedades da mecânica quântica na Ciência da Computação, que tem como foco principal o desenvolvimento do computador quântico. Os grandes trunfos da Computação Quântica são sobreposição/superposição e o emaranhamento/entrelaçamento (SOBRAL-MACHADO, 2019).

Abaixo temos ilustrada uma rede de Junções Josephson, que mostra as ilhas supercondutoras (quadrados alaranjados). O símbolo **X** entre as ilhas são as barreiras da Junção.

Figura 11 – Rede de Junções Josephson

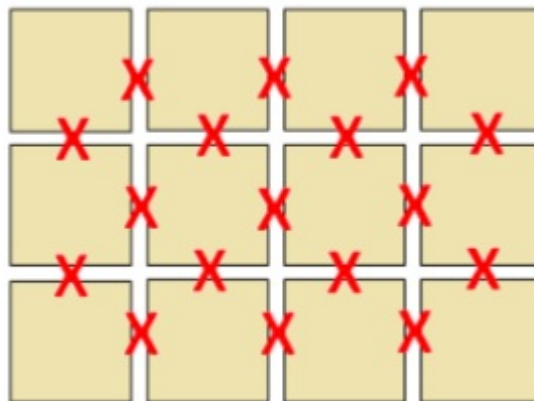


Figura cedida por Jorge Gonzalez

Para melhor visualização do esquema, podemos isolar uma parte dessa rede:

Aqui, as fases invariantes por calibre estão representadas por  $\gamma_n$ , e as correntes de cada loop estão ilustradas na figura. Cada mecha da rede resultará em um conjunto de equações particular. Considerando o primeiro loop (à esquerda na figura) a equação para as fases pode ser generalizada como:

$$-\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 - \gamma_4 = 2\pi \left( n_1 - \frac{\Phi_1}{\Phi_0} \right) \quad (3.21)$$

O fluxo induzido ( $\Phi_{1S}$ ) na mecha que está sendo analisada pode ser separado do fluxo

Figura 12 – Duas mechas particulares da figura (11)

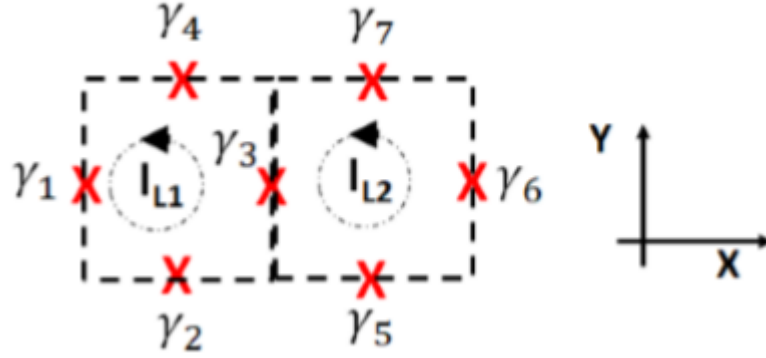


Figura cedida por Jorge Gonzalez

externo:  $\Phi_1 = \Phi_{ext} + \Phi_{1S}$ . Então a equação (3.21) pode ser escrita como:

$$-\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 - \gamma_4 + 2\pi \frac{\Phi_{1S}}{\Phi_0} = 2\pi \left( n_1 - \frac{\Phi_{ext}}{\Phi_0} \right) \quad (3.22)$$

Outro aspecto a ser considerado é que o fluxo induzido na mecha 1 pode ser estar correlacionado com as correntes que estão circulando todas as mechas restantes, incluindo a própria mecha sob análise:

$$\Phi_{1S} = L_{1,1}I_{L,1} + L_{1,2}I_{L,2} \quad (3.23)$$

Na equação (3.23)  $L_{1,1}$  representa a auto-indutância e  $L_{1,2}$  a indutância mútua entre as mechas 1 e 2. Finalmente, as correntes nas mechas podem estar relacionadas com as correntes nos ramos particulares, por exemplo:  $I_C \sin(\gamma_3) = I_{L,1} - I_{L,2}$ .

Considerando, agora, o loop da direita, as equações serão:

$$-\gamma_3 + \gamma_5 + \gamma_6 - \gamma_7 + 2\pi \frac{\Phi_{1S}}{\Phi_0} = 2\pi \left( n_2 - \frac{\Phi_{ext}}{\Phi_0} \right) \quad (3.24)$$

$$\Phi_{2S} = L_{2,1}I_{L,1} + L_{2,2}I_{L,2} \quad (3.25)$$

Em suma, as equações (3.22), (3.23), (3.24) e (3.25) descrevem o arranjo de Junções Josephson mostrado na figura (12). Essas equações podem ser resumidas com uma notação matricial e podem ser generalizadas para redes maiores de junções, para isso é necessário introduzir algumas matrizes:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

A matriz  $\mathbf{M}$  capta as propriedades das fases do circuito. O número de linhas indica o número de loops e o número de colunas está relacionado com o número de junções.

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} L_{1,1} & L_{1,2} \\ L_{2,1} & L_{2,2} \end{bmatrix}$$

A matriz  $\mathbf{L}$  é a matriz de indutância onde os elementos da diagonal principal representam a auto-indutância e os elementos fora da diagonal principal representam a indutância mútua. É possível, também, introduzir os vetores coluna denotando as fases invariantes por calibre ( $\Gamma$ ), as correntes nas junções ( $I_b$ ), as correntes nos loops ( $I_L$ ) e o número inteiro  $n$  em cada mecha:

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \\ \gamma_4 \\ \gamma_5 \\ \gamma_6 \\ \gamma_7 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{I}_b = \begin{bmatrix} I_{C1} \sin(\gamma_1) \\ I_{C2} \sin(\gamma_2) \\ I_{C3} \sin(\gamma_3) \\ I_{C4} \sin(\gamma_4) \\ I_{C5} \sin(\gamma_5) \\ I_{C6} \sin(\gamma_6) \\ I_{C7} \sin(\gamma_7) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{I}_L = \begin{bmatrix} I_{L,1} \\ I_{L,2} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{n} = \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \end{bmatrix}$$

Com essas definições, algumas equações podem ser definidas em termos matriciais:

$$M\mathbf{\Gamma} + \frac{2\pi}{\Phi_0} L\mathbf{I}_L = 2\pi \left( \mathbf{n} - \frac{\Phi_{ext}}{\Phi_0} \right) \quad (3.26)$$

$$M^T I_L = I_b \quad (3.27)$$

É fácil perceber que as equações (3.22) até (3.25) podem ser reproduzidas das equações (3.26) e (3.27). O sistema de equações não lineares deve ser resolvido para  $\Gamma$  e para  $I_L$ .

Finalmente, alguns comentários a respeito da energia do sistema: Como afirmado na equação (2.24), existe, no sistema, uma energia de acoplamento Josephson  $E_J$ , que é responsável por manter as fases do parâmetro de ordem acopladas nas Junções Josephson. Por outro lado, a introdução de uma indutância mútua e de uma auto-indutância, adiciona outra contribuição à energia do sistema. Esse termo é essencialmente magnético e pode ser expresso como:

$$E_m = \frac{1}{2} \sum_{ij} I_i L_{i,j} I_j \quad (3.28)$$

Se retormarmos o exemplo das duas junções acima teremos:

$$E_m = \frac{1}{2} (I_1 L_{1,1} I_1 + I_1 L_{1,2} I_2 + I_2 L_{2,1} I_2 + I_2 L_{2,2} I_2)$$

Considerando ambas contribuições para a energia, teremos a expressão geral para a energia do sistema:

$$E_T = \frac{\Phi_0 I_C}{2\pi} \sum_i \cos(\gamma_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} I_i L_{i,j} I_j \quad (3.29)$$

A energia está intimamente ligada ao cálculo do calor específico. Para temperaturas baixas o calor específico de um metal comum tem a forma:  $AT + BT^3$ , onde o termo linear é devido às excitações eletrônicas e o termo cúbico é devido às vibrações da rede. Abaixo da temperatura crítica supercondutora esse comportamento é alterado. Enquanto a temperatura cai abaixo de  $T_C$  (em um campo magnético zero) o calor específico pula pro valor mais alto e então decai lentamente, caindo eventualmente, para um valor muito abaixo do valor esperado para um metal comum (ASHCROFT et al., 1976) (Esse comportamento está claramente ilustrado na figura 5).

Como nosso objetivo é estimar a temperatura crítica através do pico do calor específico (transição de fase) em função da temperatura de redes de junções Josephson, calculadas pelo Método de Monte Carlo usando o algoritmo de Metrópolis, será necessário introduzir alguns conceitos fundamentais da mecânica estatística para entender como como a energia se relaciona com o calor específico e como esses algoritmos devem ser implementados baseados nesses conceitos.

## 4 A Mecânica Estatística

A Mecânica Estatística estuda as propriedades físicas dos sistemas macroscópicos a partir de propriedades atômicas (SEARS; SALINGER; LEE, 1975). É difícil estudar as equações de movimento de cada partícula em um sistema macroscópico, visto que o número de partículas desse sistema é muito elevado. Dessa forma, é necessário realizar um tratamento estatístico no qual se tomam médias sobre variáveis microscópicas que não são observáveis, afim de reduzir as equações matemáticas. Um exemplo disso pode ser descrito por um gás com  $N = 10^{25}$  partículas macroscópicas. Se a mecânica clássica for utilizada, tratando cada partícula como um corpo puntiforme, o sistema terá  $6N$  (ou mais) equações diferenciais acopladas a resolver. As quantidades macroscópicas são a soma das contribuições dos constituintes microscópicos. Podemos estudar vários fenômenos conhecendo a física estatística, entretanto os mais importantes para o caso presente são os que ocorrem em sistemas que possuem singularidades, ou seja, que ocorrem transições de fase. Para que esses estudos possam ser realizados, será necessário introduzir alguns conceitos básicos da mecânica estatística.

### 4.1 Conceitos Fundamentais

**FUNCIONAMENTO DA MECÂNICA ESTATÍSTICA:** Para compreender melhor como a mecânica estatística funciona, é necessário o **Postulado Fundamental da Física Estatística:** um sistema isolado e em equilíbrio termodinâmico, possui todos os microestados acessíveis com a mesma probabilidade de serem acessados (SALINAS, 1997).

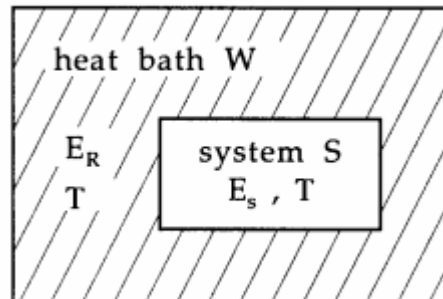
**ENSEMBLE:** Conjunto muito grande de sistemas idênticos. É uma idealização que consiste em considerar um grande número de cópias virtuais do sistema, cada uma representando um estado físico possível em que o sistema pode estar. Pode ser considerado como uma distribuição de probabilidade para o estado do sistema.

**ENSEMBLE MICROCANÔNICO:** Caracteriza-se por ser um sistema físico isolado, com energia  $E$  constante, onde não há troca de partículas com o meio externo, logo número de partículas  $N$ , também permanece constante. E sendo um sistema rígido, o volume é inalterado, dessa forma, as grandezas que caracterizam o ensemble microcanônico são  $(E, N, V)$ .

**ENSEMBLE CANÔNICO:** É usado na descrição de um sistema que não está isolado, mas em contato térmico com outro reservatório, como representado na figura (13). A energia pode variar, mas sua temperatura, uma vez que o equilíbrio térmico é atingido,

permanece constante. Logo, as grandezas físicas macroscópicas que descrevem o sistema são  $(T, N, V)$ .

Figura 13 – Sistema não isolado, em contato térmico com outro reservatório



Fonte: (GREINER et al., 2011)

**DISTRIBUIÇÃO DE BOLTZMANN:** Considerando um sistema  $S$ , em equilíbrio, a uma temperatura  $T$ . Se  $S$  for macroscópico,  $T$  é uma de suas variáveis macroscópicas bem definidas. Se  $S$  for microscópico, a temperatura  $T$  indica que ele está em equilíbrio térmico com um sistema maior que ele (que também está à temperatura  $T$ ). Em ambas as situações, o microestado  $m$  de  $S$ , num dado instante  $t$ , é uma variável aleatória. Nestes casos, a distribuição de probabilidade para  $m$  é:

$$P_B(m) = \frac{e^{-\frac{E_m}{k_B T}}}{\sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}}} \quad (4.1)$$

Essa expressão é chamada de Distribuição de Boltzmann ou Distribuição Canônica (HUANG, 1987). O ensemble canônico é o conjunto de microestados associados à distribuição de probabilidades acessíveis a um sistema  $S$  (dada pela equação (4.1)), em contato com um reservatório térmico a temperatura  $T$ . O denominador da equação (4.1) é chamado de função de partição canônica e desempenha um papel fundamental na descrição do ensemble canônico (SALINAS, 1997).

$$Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}} \quad (4.2)$$

A partir dessas funções, é possível definir a energia interna e o calor específico.

**ENERGIA INTERNA E CALOR ESPECÍFICO:** A energia interna é a fração da energia total de um sistema físico que é determinada apenas pelo seu estado e que corresponde a soma das energias cinética e potencial das partículas que compõem o

sistema (PATHRIA; BEALE, 2021). A energia interna de uma amostra é definida como a média de ensemble das energias dos microestados:

$$U \equiv \langle E \rangle = \sum_m E_m \frac{e^{-\beta E_m}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} \quad (4.3)$$

Onde  $\beta = \frac{1}{K_B T}$ . É possível escrever a equação (4.3) em função da função de partição canônica da forma:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_m E_m \frac{e^{-\beta E_m}}{Z(\beta, T, V)} = \frac{1}{Z} \sum_m E_m e^{-\beta E_m} \\ \langle E \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_m -\frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_m} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_m e^{-\beta E_m} \end{aligned}$$

Novamente, a função de partição canônica aparece, então, a equação acima pode ser escrita em função dela da forma:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} Z \\ \langle E \rangle &= -\frac{\partial \ln Z(\beta, T, V)}{\partial \beta} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Uma forma de calcular flutuações no valor da energia é por meio do desvio quadrático médio, que é definido da forma:

$$\langle \Delta E^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (4.5)$$

Que também pode ser escrito em função de  $Z$ . Se for tomada a derivada parcial em relação a  $\beta$  da equação (4.4):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} \langle E \rangle &= \frac{\partial}{\partial \beta} \left[ \frac{1}{Z} \sum_m E_m e^{-\beta E_m} \right] \\ &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \frac{1}{Z} \sum_m E_m e^{-\beta E_m} + \frac{1}{Z} \sum_m E_m \frac{\partial e^{-\beta E_m}}{\partial \beta} \\ &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \langle E \rangle - \frac{1}{Z} \sum_m E_m^2 e^{-\beta E_m} \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \langle E \rangle = \langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle = -\langle \Delta E^2 \rangle \quad (4.7)$$



$$\langle \Delta E^2 \rangle = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z \quad (4.8)$$

Assim, fica escrito o desvio quadrático médio em função da Função de partição canônica. O calor específico é definido como:

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (4.9)$$

Que pode ser escrito em função do desvio quadrático médio:

$$C_V = \frac{1}{K_B T^2} \langle \Delta E^2 \rangle \quad (4.10)$$

Nas vizinhanças de um ponto crítico, determinadas derivadas termodinâmicas, como compressibilidade ou calor específico, podem apresentar um comportamento singular ou anômalo, caracterizando um estado crítico da matéria (SALINAS, 1997). Dessa forma, vamos utilizar o Método de Monte Carlo para simular redes de tamanhos diversos e obter um gráfico do calor específico em função da temperatura. Com o calor específico, será possível fazer uma análise da temperatura crítica observando os picos.

## 4.2 Método de Monte Carlo

O Método de Monte Carlo (MMC) pode ser designado por qualquer método estatístico que se baseia em amostragens aleatórias massivas para obter resultados numéricos (NEWMAN; BARKEMA, 1999), ou seja, um método que repete sucessivas simulações um elevado número de vezes para calcular probabilidades. Numa simulação de Monte Carlo tenta-se seguir a "dependência temporal" de um modelo para o qual mudança ou crescimento não segue um padrão rigorosamente predefinido, mas sim uma maneira estocástica que depende de uma sequência de números aleatórios que são gerados durante o processo.

Dependendo das razões para a simulação, haverá certas quantidades de interesse que se quer determinar. No entanto, a evolução do modelo ao longo do tempo frequentemente envolve uma estrutura lógica complexa de seus elementos, assim nem sempre é evidente como acompanhar essa evolução de modo a determinar estas quantidades de interesse. O estudo do método requer conhecimento de diferentes áreas: Probabilidade, para descrever processos e experimentos aleatórios, Estatística para analisar os dados, Ciência da Computação para implementação eficiente de algoritmos e Programação Matemática para formular e resolver problemas de otimização.

Existem limitações para o MMC, pois os computadores possuem memória limitada e simulações muito longas tornam-se inviáveis (BINDER; HEERMANN, 2013). Há também

os erros estatísticos que devem ser considerados. Todos os computadores funcionam com uma precisão limitada para valores numéricos, truncamentos e arredondamentos podem resultar em problemas sérios nos resultados. Para que isso seja resolvido, é recomendado começar com programas relativamente simples e usar sistemas pequenos com tempos curtos de duração.

Como o Método de Monte Carlo se refere ao método numérico que busca a solução de um problema por uma abordagem que envolve um sorteio de muitos números aleatórios e o cálculo de médias apropriadas. Em um ensemble ideal, há um número muito grande de sistemas hipotéticos  $N_m$ , em cada microestado  $m$ , proporcional à probabilidade de se encontrar o sistema físico no microestado  $m$ . Num cálculo de média por Monte Carlo será usada (SCHERER, 2005):

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N A(\alpha) \quad (4.11)$$

Onde  $\langle A \rangle$  é a média de ensemble de uma variável  $A$  - média aritmética dos valores de  $A$  sobre todos os sistemas do ensemble.  $\alpha$  é um sistema do ensemble e  $A(\alpha)$  é o valor da variável  $A$  nesse sistema. Nesse caso, ao invés de somar sobre todos os sistemas do ensemble, é feito um sorteio de uma amostra de  $N$  sistemas, distribuídos pelos microestados conforme a distribuição de probabilidade  $P(m)$ : sorteamos  $N$  microestados,  $m = m_1, \dots, m_n$  com probabilidades  $P(m_j)$  e substituímos a soma sobre  $\alpha$  pela soma sobre os microestados da amostra:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{m=m_1}^{m_N} A(m) \quad (4.12)$$

O algoritmo de metrópolis, é uma forma de obter tal amostra, distribuída segundo a distribuição de Boltzmann.

### 4.3 O Algoritmo de Metrópolis

É uma versão particular do Método de Monte Carlo e tem como objetivo encontrar os valores das variáveis macroscópicas de um sistema físico em equilíbrio a uma dada temperatura  $T$ . Os valores de equilíbrio das variáveis macroscópicas podem ser calculados como médias de seus valores em todos os microestados compatíveis com os vínculos, tendo a distribuição de Boltzmann como peso. A ideia básica do método é: partir de um microestado inicial qualquer e realizar uma sequência muito grande de transições aleatórias, até encontrar o macroestado de equilíbrio (até que as variáveis macroscópicas, obtidas como médias sobre os microestados percorridos, adquiram valores constantes) (SCHERER, 2005).

Um sistema físico é considerado ERGÓDICO quando qualquer um de seus microestados pode ser alcançado a partir de outro através de uma sequência de transições. Uma consequência importante dessa característica é que uma média temporal, sobre um tempo suficientemente longo, tem o mesmo resultado que uma média de ensemble. Como no algoritmo de Metrópolis são efetuadas médias temporais, é uma exigência que o sistema seja ergódico (BIRKHOFF, 1942). Uma outra condição é que: uma sequência aleatória de transições leve ao macroestado de equilíbrio. O ponto principal aqui, não é saber o caminho pelo qual o sistema chega ao equilíbrio a partir de um microestado inicial arbitrário, por isso, é possível escolher qualquer sequência de transições, mesmo que ela não seja fisicamente plausível, desde que a distribuição final de microestados seja a de equilíbrio  $\rightarrow$  Distribuição de Boltzmann. E para isso, será utilizado o princípio do balanço detalhado:

Consideremos um ensemble de sistemas físicos com distribuição de probabilidade para os microestados  $m$ , no instante  $t$  sendo  $P(m, t)$ . É possível relacionar as distribuições de probabilidade em dois instantes diferentes usando:

$$P(m, t) = \sum_{m'} P(m, t|m', t')P(m', t') \quad (4.13)$$

Supondo que a distribuição de probabilidade do ensemble obedece a relação:

$$P(m, t|m', t')P(m', t') = P(m', t|m, t')P(m, t') \quad (4.14)$$

E substituindo (4.14) em (4.13):

$$P(m, t) = \sum_{m'} P(m', t|m, t')P(m, t') = P(m, t') \quad (4.15)$$

Porque  $\sum_{m'} P(m', t|m, t') = 1$ . A hipótese acima implica em uma distribuição de probabilidade constante no tempo para os microestados, ou seja,  $P(m, t) = P(m)$  é uma distribuição de equilíbrio. Como  $P(m, t')$  não depende de  $t'$ , fazendo  $t' = 0$ :

$$P(m, t|m', 0)P(m') = P(m', t|m, 0)P(m) \quad (4.16)$$

A derivada de (4.16) em relação a  $t$  em  $t = 0$  é:

$$\left. \frac{dP(m, t|m', 0)}{dt} \right|_{t=0} P(m') = \left. \frac{dP(m', t|m, 0)}{dt} \right|_{t=0} P(m) \quad (4.17)$$

As derivadas acima são conhecidas como probabilidades de transição e são denotadas por  $\Lambda_{mm'}$  e  $\Lambda_{m'm}$  respectivamente, (4.17) pode ser escrita da forma:

$$\Lambda_{mm'}P(m') = \Lambda_{m'm}P(m) \quad (4.18)$$

Que costuma ser chamada de princípio do balanço detalhado (PBD) e ela representa condição suficiente para que a distribuição  $P(m)$  seja de equilíbrio. A equação (4.18) pode ser reescrita na forma (RAFTERY; LEWIS, 1991):

$$\frac{P(m)}{P(m')} = \frac{\Lambda_{mm'}}{\Lambda_{m'm}} \quad (4.19)$$

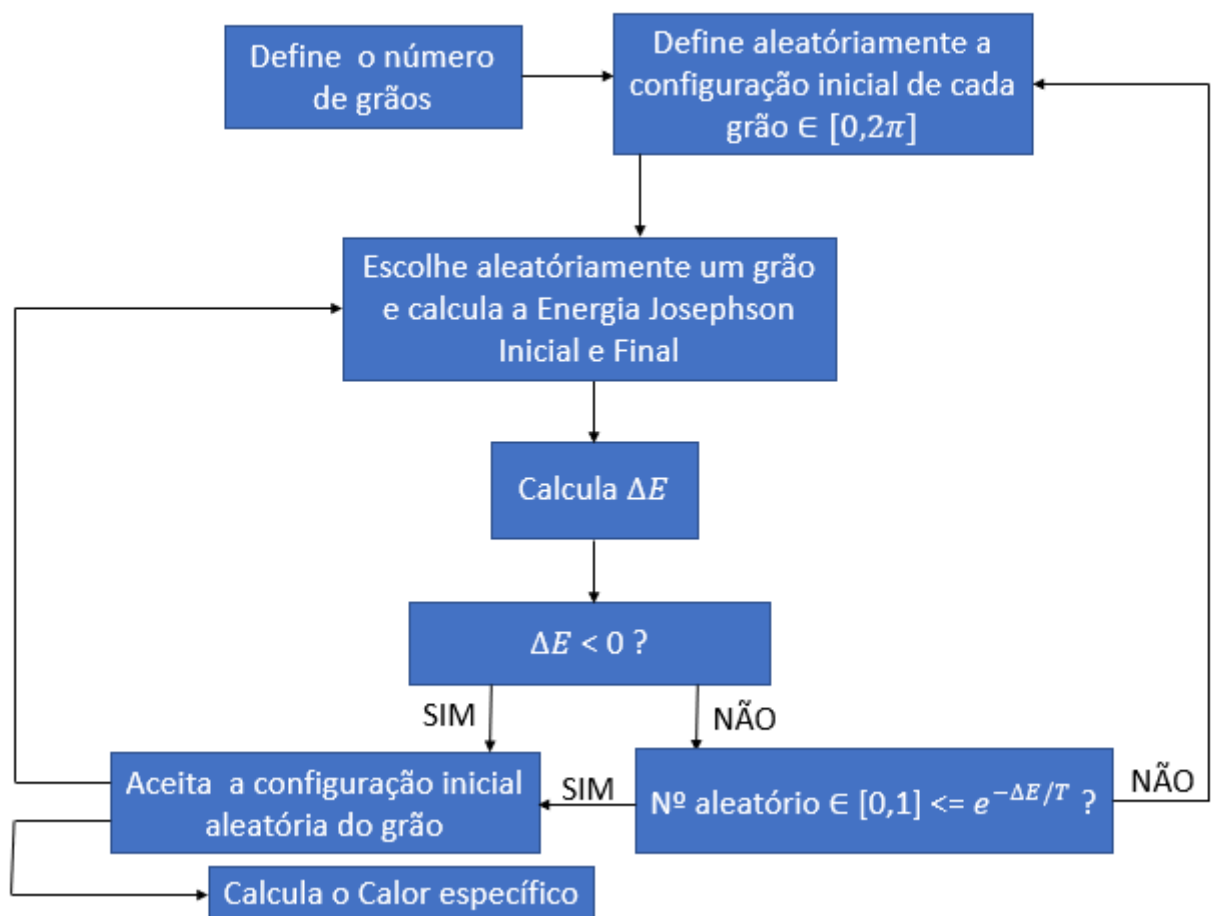
E assim é possível notar que: um microestado  $m$  em equilíbrio será mais populoso quanto maior for a probabilidade de transição dos demais estados para ele ( $\Lambda_{mm'}$ ) e quanto menor for a probabilidade de transição dele para os outros estados ( $\Lambda_{m'm}$ ).

No caso presente, serão escolhidos  $\Lambda_{mm'}$  de maneira a satisfazer a equação (4.18), com  $P(m)$  dado pela distribuição de Boltzmann. Nesse procedimento é realizada uma sequência de sorteios de transições entre os microestados. O código utilizado para os cálculos nesse trabalho funciona da seguinte forma:

1. Quem está operando o código, define o número de grãos da rede;
2. O programa define aleatoriamente a configuração inicial de cada grão  $\in [0, 2\pi]$ ;  
O algoritmo de Metrópolis entra em ação;
3. Sorteia-se um microestado  $m'$  (no caso do programa é sorteado um grão de forma aleatória), de uma forma que seja apropriado ao modelo de sistema físico em questão.
4. Se a energia do estado  $m'$  for menor ou igual a de  $m$  ( $E_{m'} \leq E_m$ ) aceita-se  $m'$  como novo estado e pula pro item (6). Se  $E_{m'} > E_m$  segue pro item (5). (No caso do programa é calculada a energia Josephson inicial e final e  $\Delta E = E_{Jf} - E_{Ji}$  e se  $\Delta E < 0$  pula pro item (6) se não, segue pro item (5)).
5. Se  $\Delta E > 0$  sorteia-se um número  $r \in [0, 1]$  se  $r \leq e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$ , aceita a transição, se não rejeita a transição e retorna ao item (1).
6. Calculam-se macrovariáveis que geralmente são somas sobre as variáveis microscópicas e guardam-se os resultados.
7. Após um grande número de sorteios, efetuam-se as médias das macrovariáveis que foram guardadas.

O objetivo central é simular a transição de fase de uma rede de junções, via pico do calor específico. O algoritmo permite verificar essa transição, se os parâmetros apropriados forem usados. O programa parte de uma configuração inicial aleatória de fases do parâmetro de ordem em busca de uma configuração de equilíbrio. Primeiramente, é necessário que o programa faça algumas simulações de aquecimento (número definido pelo parâmetro *tannealing*) para chegar a um valor de energia próximo ao equilíbrio antes de começar a registrar os dados. No equilíbrio a energia flutua em torno de um valor médio, e a cada *stepR* o valor da energia é calculado e computado. Ou seja, ele calcula a energia para cada microestado e é necessário que esses microestados tenham um intervalo entre si, para que eles não estejam correlacionados. O *stepM* varia a fase de cada grão num pequeno intervalo e o passo de Monte Carlo verifica se essa configuração é aceita, da forma que foi descrito pelo algoritmo de Metrópolis. Os valores são então computados fornecendo como resultado um valor de energia para cada temperatura. A partir desses valores, utilizando a equação (4.10), o algoritmo calcula o calor específico. O parâmetro *numC* faz com que todos esses passos sejam repetidos para que um valor de energia médio com o respectivo desvio padrão seja determinado para cada temperatura. O resultado final é representado por um gráfico dos pontos que caracterizam o comportamento de  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$ , onde  $T_J$  é a temperatura Josephson característica da rede. A temperatura crítica supercondutora  $T_C/T_J$  de cada rede é aquela relativa ao valor de pico de  $c_v/k_B$  obtido por meio do ajuste de uma gaussiana, onde  $T_C$  representa o máximo da Gaussiana sobre os pontos simulados (resultados). Para simplificar os passos que foram descritos acima, segue o diagrama para melhor compreensão do Algoritmo:

Figura 14 – Diagrama Simplificado para o Algoritmo de Metrópolis



Fonte: O autor

## 5 Resultados

Aqui apresentamos uma análise da dependência do calor específico em função da temperatura e, conseqüentemente, da temperatura crítica (pico do calor específico) com os parâmetros do algoritmo. Os parâmetros são:  $numMsteps$  que é número de passos de Monte Carlo que o programa vai realizar,  $stepM$  tamanho do passo de Monte Carlo,  $stepR$  (entra como uma condição para salvar um valor de energia, por exemplo se ele for 50, a cada 50 passos, ele salva um valor de energia, e serve para que o programa encontre valores de energia que não estejam correlacionados entre si), o parâmetro  $tannealing$  representa número de interações de aquecimento até que os resultados comecem a convergir - nesta etapa preliminar os valores de saída ainda não são computados e  $numC$  é o número de vezes que o programa se repete desde o início, nesta etapa os dados de saída já são computados para comporem o resultado final. O número de simulações calcula um valor de energia e seu desvio padrão para cada temperatura, toda vez que o programa é executado, que será usada para obter o calor específico. Primeiramente usamos uma rede 4x4 (no caso 5x5, visto que as dimensões da rede serão sempre os valores de entrada  $n_x + 1$  e  $n_y + 1$ , pois o programa começa contar do 0 até o valor estabelecido).

### 5.1 Rede 4x4

A Figura (15) mostra um diagrama esquemático para uma rede 4x4. Os parâmetros iniciais de entrada (PIE), utilizados como ponto de partida para o estudo, foram:  $numMsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numMC = 5$ . A Figura (16) mostra o comportamento de  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para os PIE. Como mencionado anteriormente, o algoritmo permite encontrar o ponto de transição de fase, caso os parâmetros apropriados sejam utilizados. O que faz dessa tarefa uma tarefa não tão simples, visto que existem 5 fatores diferentes que podem assumir um intervalo significativo de valores a serem testados para que a situação ideal seja encontrada.

Como podemos perceber, o resultado apresentado na Figura (16) não foi satisfatório, pois não há uma região com um pico  $c_v$  definido e, dessa forma, não é possível determinar uma temperatura de transição de fase supercondutora. Em busca de tentar encontrar um pico do  $c_v$ , variou-se os seguintes parâmetros de entrada do algoritmo, um de cada vez, sempre mantendo os demais constantes com os valores PIE:  $numMCsteps$  (1000, 25000, 50000 e 70000),  $stepM$  (0,01; 0,015; 0,0175; 0,02; 0,025; 0,0375; 0,04375; 0,04; 0,05; 0,06; 0,07; 0,075; 0,08; 0,0875; 0,09; 0,1; 0,105 e 0,12),  $stepR$  (10, 25, 50 e 100),  $tannealing$  (1000, 25000, 35000, 50000) e  $numC$  (5 e 10). Em nenhum dos resultados obtidos com um conjunto de parâmetros variados conforme as condições acima foi encontrado um pico

definido no comportamento de  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$ . Outro resultado a ser destacado são os valores obtidos para a largura  $w$  da gaussiana utilizada para o ajuste da variação de  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$ . Esses resultados indicam que um sistema termodinâmico de redes de junção Josephson 4x4 ainda é muito pequeno para que o algoritmo de Metropolis consiga encontrar uma condição de equilíbrio, ou seja, um pico mais estreito ( $w$  pequeno) e definido no comportamento de  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$ , pelo menos dentro da faixas de variação utilizadas para os parâmetros.

Dessa forma, concluímos que é necessário aumentar o tamanho da rede para



Figura 15 – Rede 4x4

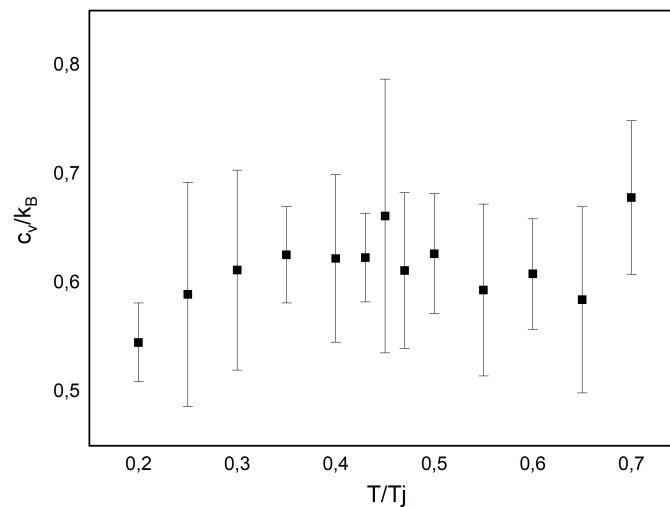


Figura 16 –  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$ .



encontrar um comportamento satisfatório para  $c_v$ , que possa definir uma temperatura crítica.

## 5.2 Variação do tamanho de rede

As Figuras (17) a (21) mostram os comportamentos de  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  obtidos pelo algoritmo Metropolis com os parâmetros PIE para redes de junções Josephson 7x7, 9x9, 10x10, 14x14 e 31x31, respectivamente. Os valores de  $T_C/T_J$  e  $w$  encontrados foram, respectivamente:  $0,508 \pm 0,007$  e  $0,087 \pm 0,007$  (7x7);  $0,479 \pm 0,005$  e  $0,075 \pm 0,006$  (9x9);  $0,456 \pm 0,006$  e  $0,063 \pm 0,005$  (10x10);  $0,456 \pm 0,007$  e  $0,10 \pm 0,01$  (14x14) e  $0,38 \pm 0,02$  e  $0,15 \pm 0,03$  (31x31).

Os resultados revelam picos definidos para redes 7x7 até 14x14, com um valor máximo de  $c_v/k_B$  para uma rede 9x9 e um pico mais estreito para uma rede 10x10. Não houve uma boa definição para uma rede 31x31, provavelmente porque precisariamos de um maior tempo computacional (maior  $numC$ , *tannealing* ou  $numMCsteps$ ) para obter um pico definido. Verificamos, portanto, que redes 9x9 e 10x10 teriam tamanhos otimizados quando se usa os parâmetros PIE. Entretanto, não sabemos qual o comportamento quando variamos os parâmetros de forma similar ao que fizemos para uma rede 4x4. Assim, escolhemos a rede 7x7 que apresenta um pico definido, um menor tamanho e, conseqüentemente, que gerará um menor custo computacional, para estudar a influência de cada parâmetro sobre os resultados.

## 5.3 Rede 7x7 - variando numMCsteps e mantendo os outros parâmetros PIE constantes

A figura (22) mostra que para um número de passos muito pequeno (1000), existe uma drástica diminuição do valor máximo de  $c_v/k_B$ , o que impossibilita a definição da temperatura de transição de fase. De onde podemos inferir que, como o número de passos de Monte Carlo é menor, um número menor de valores distintos de energia são registrados, fazendo com que o resultado não possua boa estatística. Já para um número maior (100 mil) mostrado na Figura (23), observamos uma temperatura crítica  $T_C/T_J = 0,504 \pm 0,004$  e a largura da gaussiana  $w = 0,10 \pm 0,01$  iguais àquelas encontradas com os PIE, dentro do erro experimental. Isso mostra que 50 mil passos já são suficientes para definir o pico, quando os parâmetros PIE são utilizados.

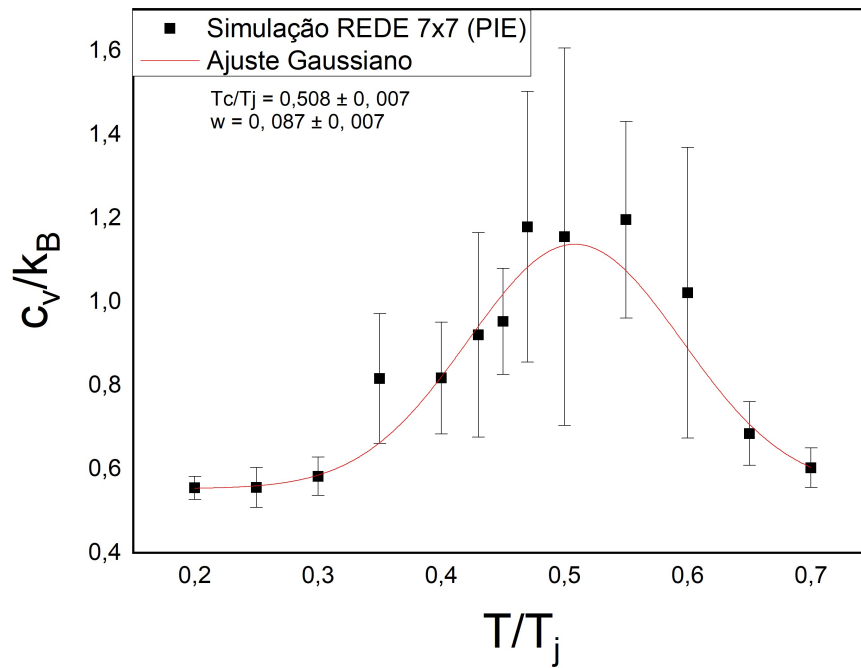


Figura 17 – Rede 7x7 -  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).

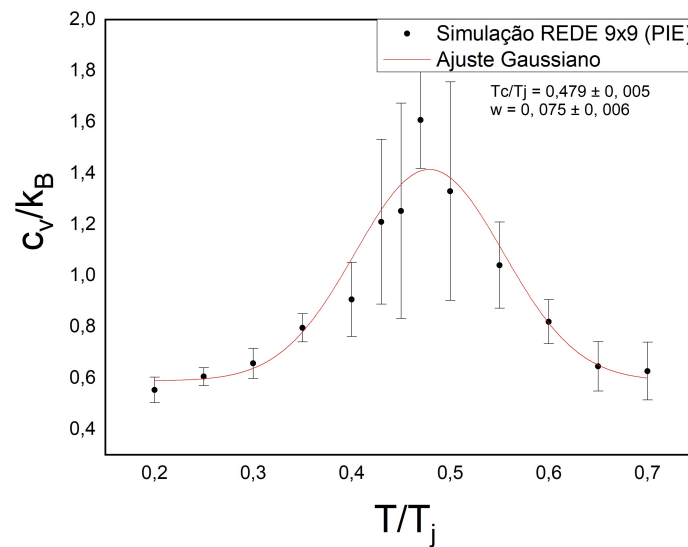


Figura 18 – Rede 9x9 -  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).

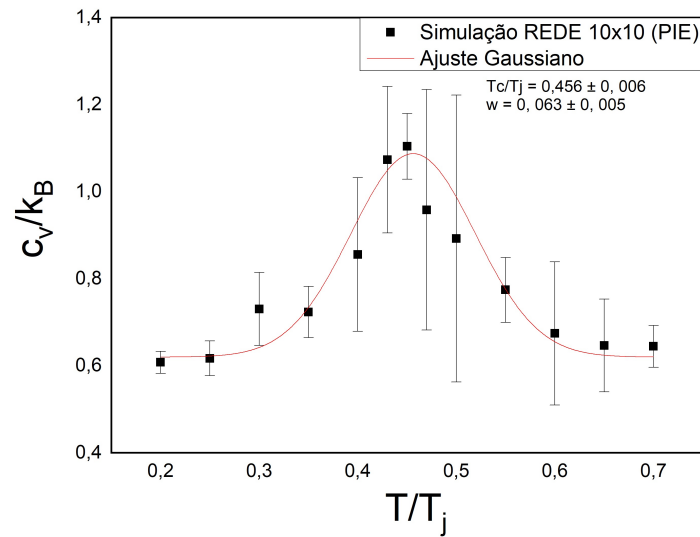


Figura 19 – Rede 10x10 -  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_j$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).

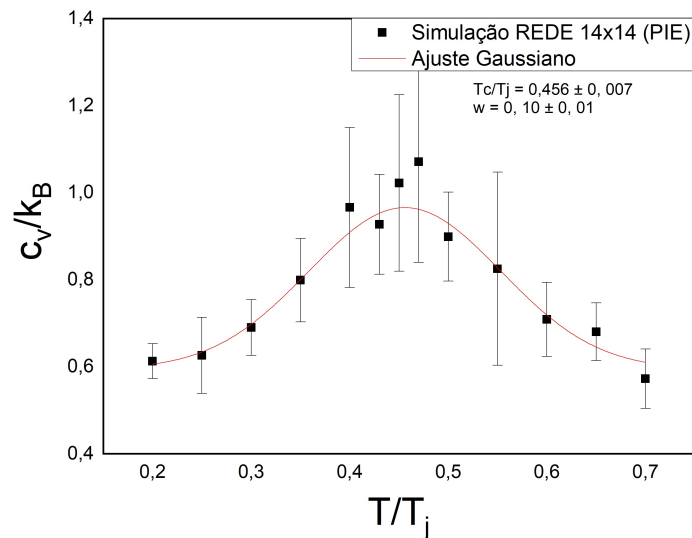


Figura 20 – Rede 14x14 -  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_j$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).

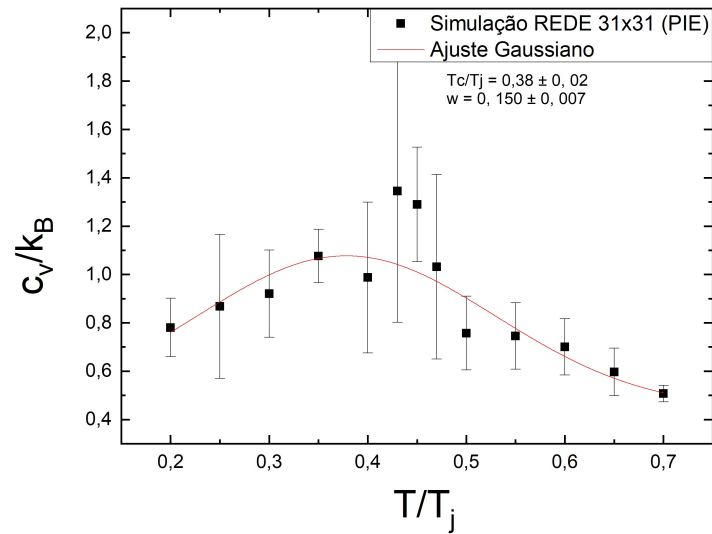


Figura 21 – Rede 31x31 -  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).

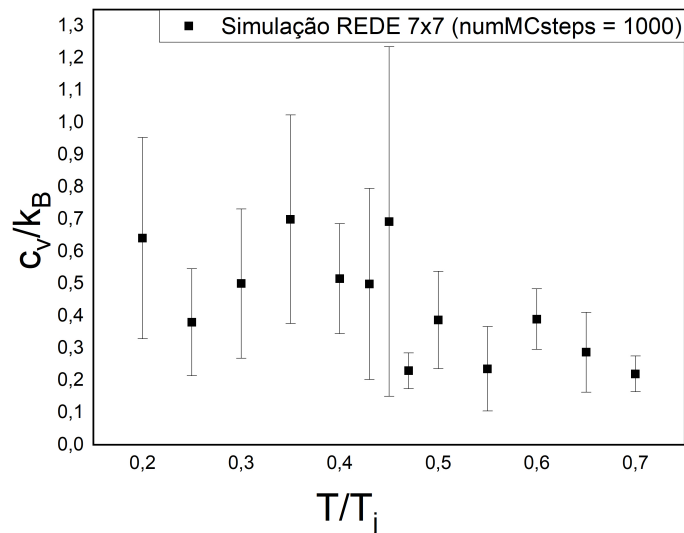


Figura 22 – Rede 7x7 -  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 1000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$

### 5.3.1 Rede 7x7 - variando *tannealing* e mantendo os outros parâmetros PIE constantes

Na Figura (24), observamos que para *tannealing* pequeno (1000), o sistema não teve um tempo de aquecimento suficiente para chegar a um valor de energia próxima do equilíbrio antes de começar a registrar os dados, não é possível encontrar uma região de transição de fase, o que gerou um resultado completamente divergente do esperado.

Na Figura (25), conseguimos observar um pico de  $c_v/k_B$  em  $T_C = 0,50 \pm 0,01$  igual ao obtido para PIE (dentro do erro experimental) e um alargamento da gaussiana  $w = 0,15 \pm 0,03$  relativo ao valor obtido para PIE quando *tannealing* = 25000.

E por fim, na Figura (26), observamos apenas uma diminuição da largura da gaussiana  $w = 0,12 \pm 0,01$  para *tannealing* = 100000 quando comparado com aquela obtida para 25 mil, mas ainda maior que aquela para 50 mil. Assim, concluímos que *tannealing* deve ser maior que 25 mil e seu valor otimizado, dentre os valores analisados, é 50 mil. Cabe ainda ressaltar que *tannealing* teve uma influência muito pequena nos resultados quando variou-se seu valor no intervalo de 25 mil a 100 mil.

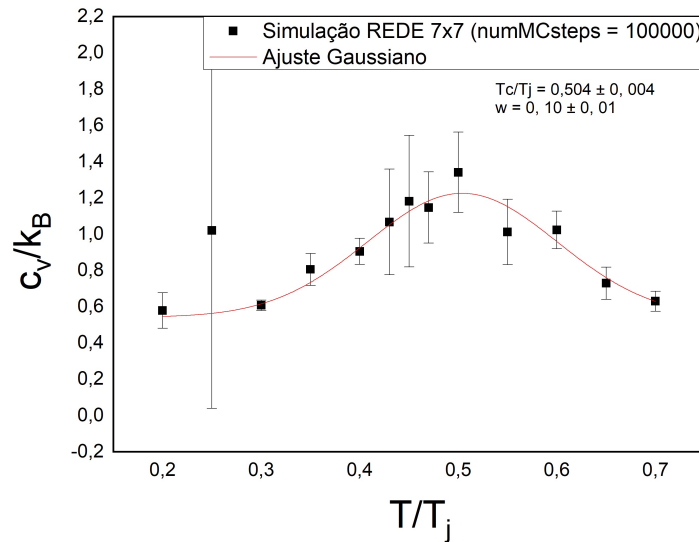


Figura 23 – Rede 7x7 -  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 100000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ , *tannealing* = 50000 e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).

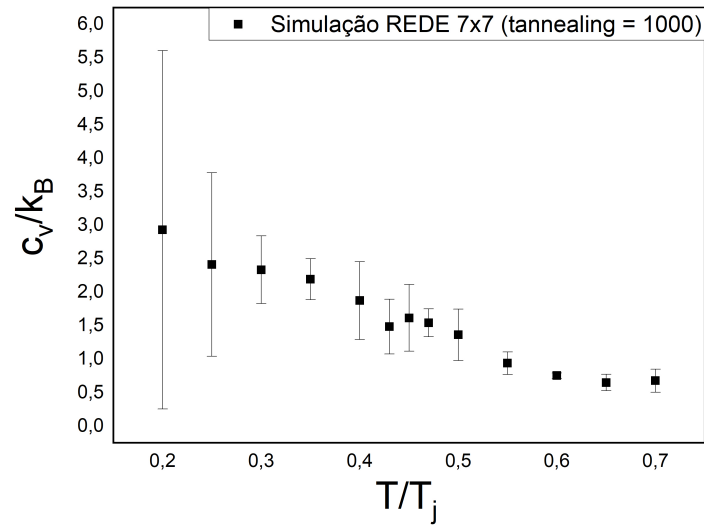


Figura 24 –  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 1000$  e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).

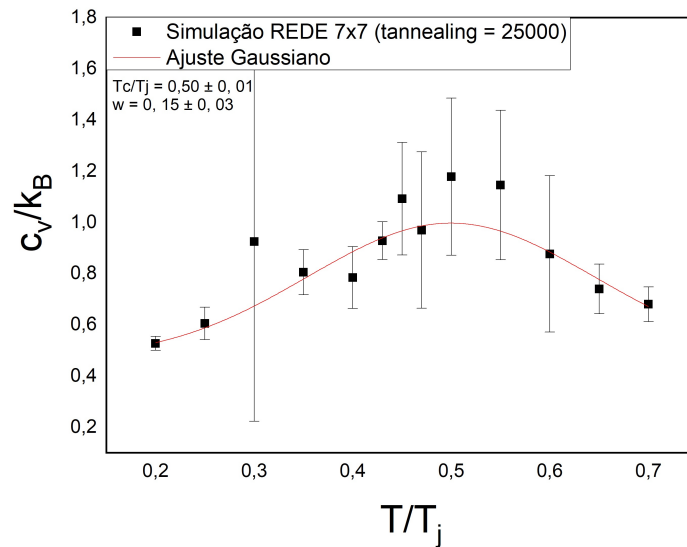


Figura 25 –  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 25000$  e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).

### 5.3.2 Rede 7x7 - variando stepR e mantendo os outros parâmetros PIE constantes

O parâmetro  $stepR$  está diretamente relacionado ao  $numMCsteps$  que é o passo de Monte Carlo, e significa que a cada  $stepR$ , um valor de energia será registrado até completar o  $numMCsteps$ . Não foi encontrada uma alteração significativa dos resultados para  $stepR = 10$  (Figura (27)), 50 (Figura (17)) e 100 (Figura (28)).

### 5.3.3 Rede 7x7 - variando stepM e mantendo os outros parâmetros PIE constantes

Ao variar o parâmetro  $stepM$ , estamos variando o intervalo em que a fase dos grãos supercondutores é alterada. Na Figura (29), o valor de  $c_v/k_B$  é muito reduzido e não apresenta um máximo, tornando impossível a determinação de  $T_C$  para um valor muito pequeno  $stepM = 0,0001$ . O mesmo comportamento se repete na Figura (30) para  $stepM = 0,01$ .

Ao aumentarmos o valor de  $stepM$  para 0,2 (Figura (31)), o pico com melhor definição encontrado dentre todos os resultados obtidos (da Figura (17) até a Figura (31)) com  $T_C = 0,494 \pm 0,004$ ,  $w = 0,08 \pm 0,01$  e com o valor máximo de de  $c_v/k_B$  próximo de 1,4 (maior encontrado para a rede 7x7). Além disso, houve uma grande diminuição das barras de incerteza. Uma análise das Figuras de (29) a (31) mostra que  $stepM$  tem uma

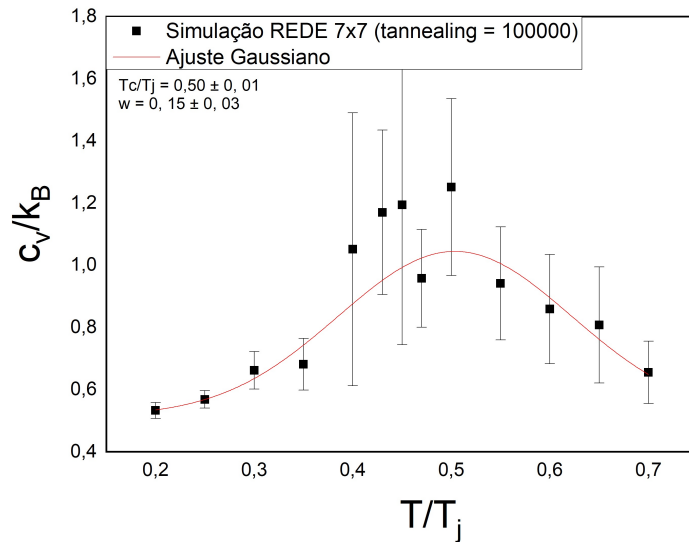


Figura 26 –  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 100000$  e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).

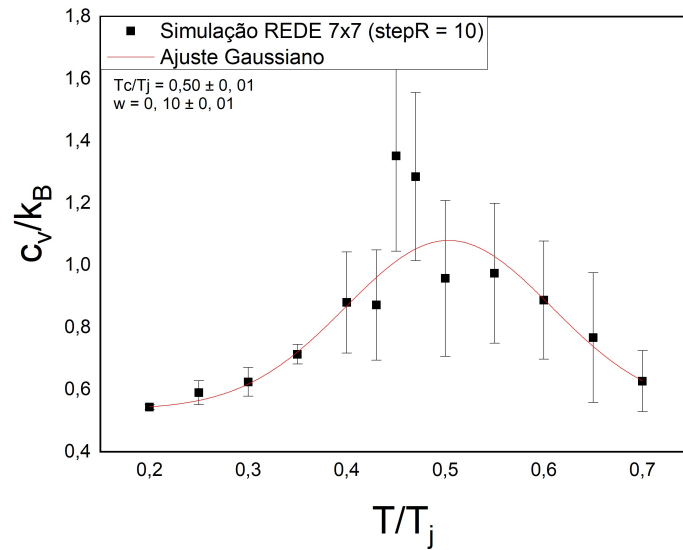


Figura 27 –  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 10$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).

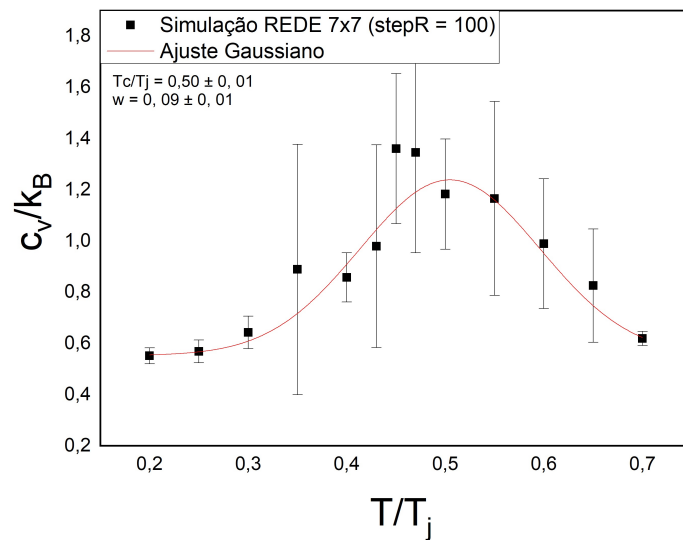


Figura 28 –  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0175 * 5$ ,  $stepR = 100$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).



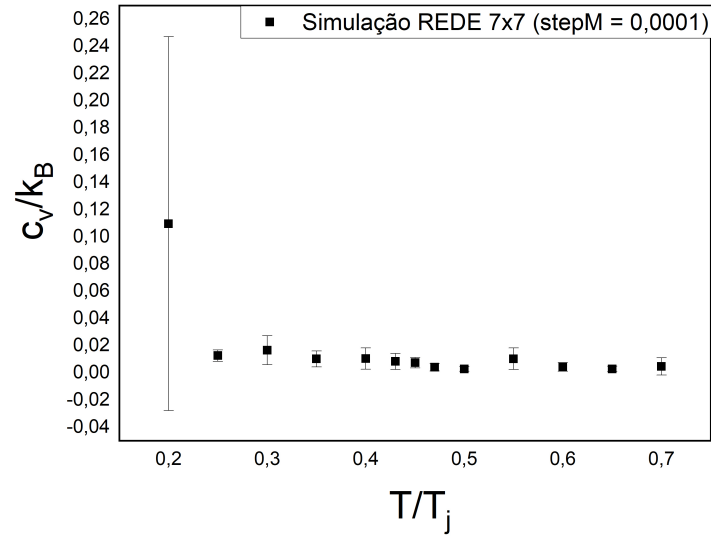


Figura 29 –  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.0001 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$

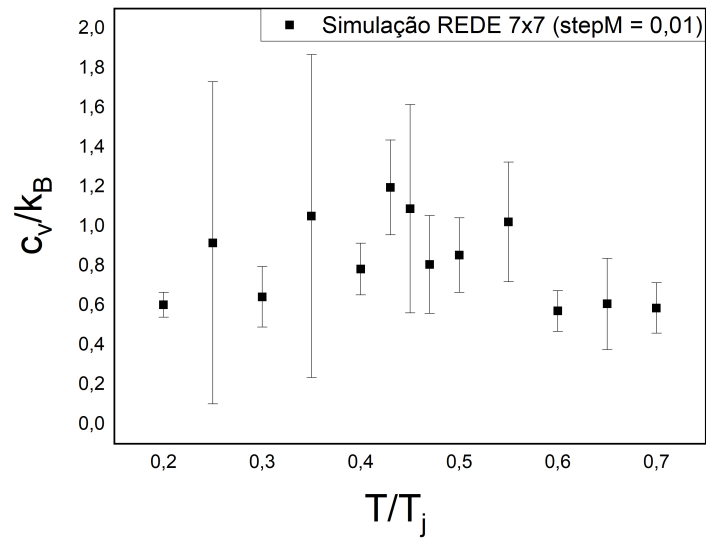


Figura 30 –  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0.01 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$

grande influência no comportamento de  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$ , onde não devem ser utilizados valores menores que 0,0175 e a definição do pico fica muito otimizada para um valor igual a 1.

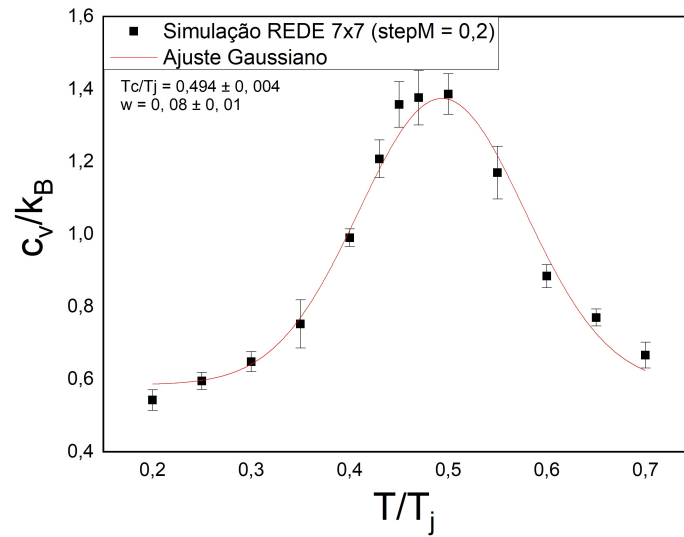


Figura 31 –  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$  para  $numMCsteps = 50000$ ,  $stepM = 0,2 * 5$ ,  $stepR = 50$ ,  $tannealing = 50000$  e  $numC = 5$ . Um ajuste gaussiano foi feito na região dos dados (linha vermelha).

## 6 Conclusão

O método estatístico de Monte Carlo via algoritmo de Metrópolis construído na plataforma MATLAB é eficaz para determinar o comportamento do calor específico de redes de junções Josephson em função da temperatura e, com isto, definir a temperatura crítica de transição para o estado supercondutor dessas redes de junções. O estudo sistemático da influência dos parâmetros de ajuste comprova que o algoritmo atinge uma condição instável de convergência para redes com tamanho 4x4 e uma condição estável para redes com tamanho entre 7x7 e 14x14. Para uma rede 7x7, a temperatura crítica reduzida encontrada é  $T_C = 0,494 \pm 0,004$  utilizando-se parâmetros de ajuste otimizados.

É possível observar também que existem parâmetros ideais para cada tipo de rede. Por exemplo, para redes pequenas (4x4), fica difícil encontrar uma região de transição de fase, o que significa que para essa configuração ainda não há um sistema termodinâmico grande o suficiente que possibilite a obtenção de um mínimo estável para a energia. A condição estável é obtida para redes com tamanho de 7x7 a 14x14, onde as redes 9x9 e 10x10 forneceram resultados otimizados quando os parâmetros iniciais de entrada (PIE) definidos neste trabalho são utilizados. O parâmetro *stepM* tem uma grande influência no comportamento de  $c_v/k_B$  em função de  $T/T_J$ . O valor otimizado de *stepM* foi igual a 1 para uma rede 7x7 (dentro os valores estudados). Assim, o resultado que apresentou um pico com uma melhor definição foi obtido com a seguinte configuração para os parâmetros do algoritmo de Metrópolis em uma rede 7x7: *numMCsteps* = 50000, *stepM* = 1.0, *stepR* = 50, *tannealing* = 50000 e *numC* = 5.

Os estudo da variação dos parâmetros poderiam ser repetidos para redes maiores, mas isto aumentaria o custo computacional e, não acrescentaria ao objetivo deste trabalho que foi apenas verificar a influência de cada parâmetro. Certamente, cada tamanho de rede terá sua configuração ideal de parâmetros. O aumento dos valores parâmetros *tannealing*, *numMCsteps*, *stepM* e *numC* sempre tenderá a otimizar os resultados, porém, também aumenta o custo computacional. Conseqüentemente, é aconselhável que se faça uma análise prévia do custo/benefício antes de aumentar o valor de um desses parâmetros em busca de um resultado melhor.

# Referências

- ABRIKOSOV, A. A. New developments in the theory of htsc. 9 1994. Disponível em: <<https://www.osti.gov/biblio/456355>>. Citado na página 15.
- ANDERSON, P. W.; ROWELL, J. M. Probable observation of the josephson superconducting tunneling effect. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 10, p. 230–232, Mar 1963. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.10.230>>. Citado na página 26.
- ANTON, H.; BIVENS, I.; DAVIS, S. Cálculo - Volume II - 10.ed. Bookman Editora, 2014. ISBN 9788582602461. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=UgByBAAAQBAJ>>. Citado na página 29.
- ASHCROFT, N. et al. Solid State Physics. Holt, Rinehart and Winston, 1976. (HRW international editions). ISBN 9780030839931. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=1C9HAQAIAAJ>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 36.
- BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. Phys. Rev., American Physical Society, v. 108, p. 1175–1204, Dec 1957. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.1175>>. Citado na página 16.
- BINDER, K.; HEERMANN, D. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction. Springer Berlin Heidelberg, 2013. (Springer Series in Solid-State Sciences). ISBN 9783662302736. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=4LR9CAAQBAJ>>. Citado na página 40.
- BIRKHOFF, G. D. What is the ergodic theorem? The American Mathematical Monthly, Taylor Francis, v. 49, n. 4, p. 222–226, 1942. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/00029890.1942.11991212>>. Citado na página 42.
- CHEN, J. T.; TODD, R. J.; KIM, Y. W. Investigation of microwave-induced dc voltages across unbiased josephson tunnel junctions. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 5, p. 1843–1849, Mar 1972. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.5.1843>>. Citado na página 26.
- CLARKE, J.; BRAGINSKI, A. The SQUID Handbook: Fundamentals and Technology of SQUIDS and SQUID Systems. Wiley, 2006. ISBN 9783527604586. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=BsTTM-nU-JkC>>. Citado na página 28.
- COSTA MARCONI B.S. E PAVÃO, A. C. Supercondutividade: um século de desafios e superação. Revista Brasileira de Ensino de Física, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/S1806-11172012000200017>>. Citado na página 23.
- DIAS, D. H. N. Comportamento da Força de Levitação em Mancais Lineares Frente a Oscilações do Supercondutor. Rio de Janeiro: [s.n.], 2010. Disponível em: <<http://repositorio.poli.ufrj.br/monografias/monopoli10000522.pdf>>. Citado na página 22.

- FEYNMAN, R.; LEIGHTON, R.; SANDS, M. The Feynman Lectures on Physics, Vol. III: The New Millennium Edition: Quantum Mechanics. Basic Books, 2015. ISBN 9780465040834. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=Lb6DBQAAQBAJ>>. Citado na página 23.
- GALLOP, J. SQUIDS, the Josephson Effects and Superconducting Electronics. [S.l.: s.n.], 2017. ISBN 9780203738887. Citado na página 28.
- GINSBERG, D. M. superconductivity. Encyclopedia Britannica, 2018. Disponível em: <<https://www.britannica.com/science/superconductivity>>. Citado na página 15.
- GREINER, W. et al. Thermodynamics and Statistical Mechanics. Springer New York, 2011. (Classical Theoretical Physics). ISBN 9781461208280. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=bpUHswEACAAJ>>. Citado na página 38.
- HOFFMANN, K.; TANG, Q. Ginzburg-Landau Phase Transition Theory and Superconductivity. Birkhäuser Basel, 2012. (International Series of Numerical Mathematics). ISBN 9783034882743. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=P8kGCAAQBAJ>>. Citado na página 15.
- HUANG, K. Statistical Mechanics. Wiley, 1987. ISBN 9780471815181. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=M8PvAAAAMAAJ>>. Citado na página 38.
- JOSEPHSON, B. Possible new effects in superconductive tunnelling. Physics Letters, v. 1, n. 7, p. 251 – 253, 1962. ISSN 0031-9163. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0031916362913690>>. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 26.
- JOSEPHSON, B. D. The discovery of tunnelling supercurrents. Reviews of Modern Physics, v. 46, p. 251–254, 1974. Citado na página 18.
- KITTEL, C.; MCEUEN, P. Introduction to Solid State Physics. Wiley John + Sons, 2018. ISBN 9781119454168. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=S3gAugEACAAJ>>. Citado na página 18.
- KUMAR, S. High Temperature Superconductors : An Overview. [S.l.: s.n.], 2019. 9 p. Citado na página 14.
- LONDON, F.; LONDON, H. The electromagnetic equations of the supraconductor. Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences, The Royal Society, v. 149, n. 866, p. 71–88, mar. 1935. ISSN 1471-2946. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1935.0048>>. Citado na página 20.
- MARKS, R. Monte carlo. In: \_\_\_\_\_. [S.l.: s.n.], 2016. p. 1–4. Citado na página 16.
- MCCUMBER, D. E. Effect of ac impedance on dc voltage-current characteristics of superconductor weak-link junctions. Journal of Applied Physics, v. 39, n. 7, p. 3113–3118, 1968. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1656743>>. Citado na página 26.
- METROPOLIS, N. The beginning of the monte carlo method. In: . [S.l.: s.n.], 1987. p. 125–130. Citado na página 16.

- MEYERS, H.; MYERS, H. Introductory Solid State Physics, Second Edition. Taylor & Francis, 1997. ISBN 9781420075021. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=x7RsC1G5N1AC>>. Citado na página 21.
- NEWMAN, M.; BARKEMA, G. Monte Carlo Methods in Statistical Physics. Clarendon Press, 1999. ISBN 9780198517979. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=J5aLdDN4uFwC>>. Citado na página 40.
- OLIVEIRA, I.; JESUS, V. D. Introdução a Física do Estado Sólido. LIVRARIA DA FÍSICA, 2005. ISBN 9788588325456. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=LsI3naqT7ZYC>>. Citado 3 vezes nas páginas 18, 21 e 29.
- ONNES, H. K. Further experiments with liquid helium. c. on the change of electric resistance of pure metals at very low temperatures etc. iv. the resistance of pure mercury at helium temperatures. In: \_\_\_\_\_. Through Measurement to Knowledge: The Selected Papers of Heike Kamerlingh Onnes 1853–1926. Dordrecht: Springer Netherlands, 1991. p. 261–263. ISBN 978-94-009-2079-8. Disponível em: <[https://doi.org/10.1007/978-94-009-2079-8\\_15](https://doi.org/10.1007/978-94-009-2079-8_15)>. Citado na página 14.
- ONNES, H. K. Further experiments with liquid helium. d. on the change of the electrical resistance of pure metals at very low temperatures, etc. v. the disappearance of the resistance of mercury. In: \_\_\_\_\_. Through Measurement to Knowledge: The Selected Papers of Heike Kamerlingh Onnes 1853–1926. Dordrecht: Springer Netherlands, 1991. p. 264–266. ISBN 978-94-009-2079-8. Disponível em: <[https://doi.org/10.1007/978-94-009-2079-8\\_16](https://doi.org/10.1007/978-94-009-2079-8_16)>. Citado na página 14.
- PATHRIA, R.; BEALE, P. Statistical Mechanics. Elsevier Science, 2021. ISBN 9780081026922. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=74mdzQEACAAJ>>. Citado na página 39.
- PIVETTA, M. A nova onda dos qubits. 2012. Disponível em: <<https://revistapesquisa.fapesp.br/a-nova-onda-dos-qubits/>>. Citado na página 16.
- PUREUR, P. Supercondutividade: Cem anos de desafios. Revista USP, n. 92, p. 142–156, fev. 2012. Disponível em: <<https://www.revistas.usp.br/revusp/article/view/34897>>. Citado na página 19.
- RAFTERY, A. E.; LEWIS, S. M. How many iterations in the gibbs sampler. In: . [S.l.: s.n.], 1991. Citado na página 43.
- SALINAS, S. Introdução a Física Estatística Vol. 09. EDUSP, 1997. ISBN 9788531403866. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=cAIP3sc0K44C>>. Citado 3 vezes nas páginas 37, 38 e 40.
- SANTOS, A. L. d. e. a. Experimento demonstrativo de levitação supercondutora: Ferramenta para problematização de conceitos físicos. Revista Brasileira de Ensino de Física [online], 2015, v. 37, n. 2. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/S1806-11173721751>>. Citado na página 15.
- SCHERER, C. Métodos Computacionais da Física. Editora Livraria da Física, 2005. ISBN 9788588325357. Disponível em: <[https://books.google.com.br/books?id=\\\_lqmTc\\\_BjVkc](https://books.google.com.br/books?id=\_lqmTc\_BjVkc)>. Citado na página 41.

- SCHRIEFFER, J. Theory of Superconductivity. W.A. Benjamin, 1964. (Frontiers in physics). Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=8WAsAAAAYAAJ>>. Citado na página 20.
- SCHUSTER, D. Circuit quantum electrodynamics. 01 2007. Citado na página 27.
- SEARS, F.; SALINGER, G.; LEE, J. Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics. Addison-Wesley Publishing Company, 1975. (Addison-Wesley principles of physics series). ISBN 9780201068948. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=3gRRAAAAMAAJ>>. Citado na página 37.
- SILVA, E. L. da Silva e. Fenômenos paramétricos de segunda ordem e transições Landau-Zener em Eletrodinâmica Quântica de Circuitos. Dissertação (Mestrado) — Universidade de Brasília, Curso de Pós-Graduação em Física, Brasília, 2017. Citado na página 27.
- SOBRAL-MACHADO, . Computação Quântica: Aspectos Físicos e Matemáticos - Uma Abordagem Algébrica. Edição do Autor, 2019. ISBN 978-85-902995-4-7. Disponível em: <<https://repositorio.ufsc.br/handle/123456789/197576>>. Citado na página 33.
- TINKHAM, M. Introduction to Superconductivity. Dover Publications, 2004. (Dover Books on Physics Series). ISBN 9780486134727. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=VpUk3NfwDIkC>>. Citado na página 15.
- WEINSTOCK, H. SQUID Sensors: Fundamentals, Fabrication and Applications. Springer Netherlands, 2012. (Nato Science Series E:). ISBN 9789401063937. Disponível em: <<https://books.google.mw/books?id=T5rCngEACAAJ>>. Citado na página 28.