

Universidade Federal de Minas Gerais

Departamento de Física

Lucas Lage Schuab

RETIFICAÇÃO DE ENERGIA E MAGNETIZAÇÃO EM CADEIAS
QUÂNTICAS DE SPIN: ANÁLISE DO MODELO XXZ

Belo Horizonte

2016

Lucas Lage Schuab

RETIFICAÇÃO DE ENERGIA E MAGNETIZAÇÃO EM CADEIAS
QUÂNTICAS DE SPIN: ANÁLISE DO MODELO XXZ

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação do Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Área de concentração: Física estatística de não equilíbrio

Orientador: Prof. Dr. Emmanuel Araújo Pereira

Coorientador: Prof. Dr. Gabriel Teixeira Landi

Belo Horizonte

2016

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, aos meus pais todo o amor, incentivo e apoio, em todos os momentos da minha vida e a todas as minhas decisões. Estendo o reconhecimento à minha irmã, presente e amiga. A vocês, que sempre estiveram ao meu lado, o meu muito obrigado.

Aos queridos familiares com os quais tenho um forte laço, agradeço o apreço, a dileção e os conhecimentos transmitidos. Agradeço, em especial, aos meus avós e à minha tão prezada tia Claudia, que sempre abraçaram as minhas causas e me encorajaram.

Aos muito estimados amigos, agradeço a presença, os intermináveis diálogos, o carinho e a confiança. A vocês, Ana Camargos, Ana Clara e Thaís, minhas irmãs de coração, que em tempo algum me deixaram esmorecer, obrigado.

A esta universidade, a todo o corpo docente, aos demais funcionários e aos colegas, agradeço o aprendizado, a convivência e a experiência ímpar proporcionada, a qual carregarei comigo eternamente.

Ao Prof. Emmanuel, agradeço a orientação, a solicitude e o empenho dedicado à elaboração deste trabalho.

Ao Prof. Gabriel Landi, meu coorientador, agradeço todas as diretrizes.

Agradeço ao CNPq o apoio financeiro.

A todos aqueles não mencionados que, direta ou indiretamente, fizeram parte da minha formação e contribuíram para que eu chegasse até aqui, deixo a minha sincera gratidão.

A Deus, mormente.

“It is our choices (...) that show what we truly are, far more than our abilities.”

(Joanne Rowling)

RESUMO

Estudou-se a retificação de energia e magnetização no sistema quântico aberto unidimensional constituído de uma cadeia de spin XXZ acoplada a um reservatório de spin em cada extremidade e sujeita a um campo magnético externo. Analisaram-se os efeitos da introdução de uma estrutura *graded* na cadeia, bem como os efeitos de um campo magnético *graded* no sistema. Apresentam-se resultados teóricos para os fluxos e também soluções exatas, obtidas por meio de cálculos computacionais, para uma cadeia pequena. Verificou-se que o sistema apresenta retificação quanto ao fluxo de energia tanto para a introdução de uma estrutura interna *graded* quanto para a introdução de um campo magnético *graded*, embora apresente retificação quanto ao fluxo de magnetização apenas no último caso. Com o intuito de mostrar que a retificação não é um fenómeno restrito ao modelo estudado, investigaram-se também, por meio de análise computacional, configurações distintas da cadeia de spin quanto ao tamanho da cadeia, às interações internas e às condições de contorno. Constataram-se as mesmas condições para a existência de retificação dos fluxos, havendo apenas uma exceção: no modelo estudado com condições de contorno distintas (*twisted XY boundary gradients*), constatou-se a existência de retificação quanto ao fluxo de magnetização também para um campo magnético uniforme.

ABSTRACT

We addressed the issue of energy and magnetization rectification in the quantum one-dimensional open XXZ spin chain driven out of equilibrium by magnetization pumping applied at its boundaries and in the presence of an external magnetic field. We analyzed the effects of the introduction of an inner graded structure in the chain, as well as the effects of a graded magnetic field in the system. We present theoretical results for the fluxes and also exact solutions, obtained by means of numerical computation, for a small chain. We verified that the energy flux exhibits rectification in both the inner graded structure case and the graded magnetic field one, although the magnetization flux exhibits rectification only in the latter situation. With a view to showing that the rectification is not a phenomenon limited to the studied model, we additionally investigated, by means of computational analysis, distinct configurations of the spin chain regarding the chain size, the internal interactions, and the boundary conditions. We found that the same conditions apply to the existence of rectification, except for one situation: with regard to the “twisted XY boundary gradients” model, the magnetization flux exhibits rectification for a uniform magnetic field as well.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	8
2	ANÁLISE DOS FLUXOS NA CADEIA SUBMETIDA A UM CAMPO MAGNÉTICO UNIFORME	15
2.1	Δ não <i>graded</i>	15
2.1.1	Cálculo do fluxo de magnetização	16
2.1.2	Cálculo do fluxo de energia.....	20
2.1.3	Análise de simetria	25
2.1.4	Soluções exatas para $N = 3$	29
2.2	Δ <i>graded</i>	32
2.2.1	Fluxo de magnetização	32
2.2.2	Fluxo de energia	32
2.2.3	Análise de simetria	33
2.2.4	Soluções exatas para $N = 3$	34
2.3	Nota sobre unidades	41
3	ANÁLISE DOS FLUXOS NA CADEIA SUBMETIDA A UM CAMPO MAGNÉTICO GRADED	43
3.1	Δ não <i>graded</i>	43
3.1.1	Fluxo de magnetização	43
3.1.2	Fluxo de energia	44
3.1.3	Soluções exatas para $N = 3$	45
3.2	Δ <i>graded</i>	47
3.2.1	Fluxo de magnetização	48
3.2.2	Fluxo de energia	48
3.2.3	Soluções exatas para $N = 3$	49
3.3	Outros resultados	67
3.3.1	$N \geq 3$	68
3.3.2	α <i>graded</i>	69
3.3.3	Modelo XXX totalmente <i>graded</i>	70
3.3.4	Modelo XXZ totalmente <i>graded</i>	72

3.3.5	<i>Twisted XY boundary gradients</i>	73
4	CONCLUSÃO	75
	REFERÊNCIAS	76
	APÊNDICE A	79
	APÊNDICE B	84

1 INTRODUÇÃO

Sistemas macroscópicos tendem a evoluir para estados cujas propriedades são determinadas apenas por fatores intrínsecos, independentes de influências externas anteriores (uma influência, hipoteticamente externa, que seja permanente – como a atuação de um campo magnético – é considerada parte do sistema). Esse estado terminal, independente do tempo, atingido por um sistema livre de perturbações, recebe o nome de equilíbrio termodinâmico. Precisamente, esse é um estado caracterizado pela ausência de fluxos no sistema. A termodinâmica é uma teoria fenomenológica que sistematiza as leis empíricas sobre o comportamento térmico dos corpos macroscópicos e que busca, sobretudo, descrever esses estados de equilíbrio.

A mecânica estatística de equilíbrio é uma teoria bem estabelecida que visa explicar propriedades macroscópicas de sistemas em equilíbrio termodinâmico a partir de considerações sobre o comportamento das partículas que os constituem [1]. Seu objetivo maior traduz-se na dedução das leis e resultados da termodinâmica. Em princípio, explicações para esses resultados poderiam ser obtidas pela aplicação direta das leis da mecânica (clássica ou quântica, dependendo do nível e interesse da análise). Esse roteiro, no entanto, mostra-se intratável devido ao número imenso de partículas envolvidas. A mecânica estatística de equilíbrio mostra como tais propriedades macroscópicas surgem em conexão com o comportamento microscópico, em que o ingente número de partículas provoca o aparecimento de regularidades peculiares – as denominadas leis estatísticas. A teoria de equilíbrio tem, pois, suas bases nas leis da mecânica e na teoria das probabilidades. Seu postulado fundamental estabelece que “em um sistema estatístico fechado, com energia fixa, todas as configurações microscópicas acessíveis são igualmente prováveis” [1]. Esse postulado é justificado *a posteriori*, por meio de suas consequências. Um argumento a favor do postulado fundamental é o princípio da indiferença [2], segundo o qual se podem meramente designar probabilidades iguais a cada possível configuração do sistema na ausência de demais informações (ou seja, na ausência de razões claras para que algumas configurações sejam mais prováveis que outras). A suposição de probabilidades iguais *a priori* retrata, de certo modo, nossa ignorância acerca do estado microscópico do sistema.

A introdução do postulado fundamental permite que autores, muitas vezes, esquivem-se de uma discussão acerca da hipótese ergódica [3] – em princípio, um pilar da

mecânica estatística de equilíbrio. Segundo essa hipótese, a média temporal de uma certa grandeza de interesse é equivalente, no equilíbrio, a uma média no espaço de fase em certos *ensembles* [4]. Essa hipótese é também justificada *a posteriori* e, na sua forma mais forte, pode ser verificada apenas para sistemas extremamente simples [1]. Por conjectura, sem a hipótese ergódica, a teoria de equilíbrio faz afirmações sobre *ensembles*, e não sobre um sistema em particular – a ergodicidade é o que permite afirmar que uma medida real em laboratório, num intervalo finito de tempo (uma média temporal), corresponde, no equilíbrio, a uma média sobre o *ensemble* estatístico. Supõe-se, para a validade dessa correspondência, que os pontos do *ensemble* sejam cópias fiéis do sistema macroscópico e que, no decorrer do tempo, a trajetória do sistema físico percorra todos os pontos do *ensemble* [1]. Entretanto, como observado pelo autor de [5], o intervalo de tempo necessário para que a trajetória de um sistema físico percorra todas as configurações possíveis é, via de regra, extraordinariamente grande (maior que a idade do universo); durante uma medição em laboratório, o sistema manifesta apenas uma exígua parcela das configurações realizáveis. A falta de provas para a validade da hipótese ergódica na maior parte das classes de modelos em mecânica estatística é alvo de controvérsias, e há uma discussão na literatura a respeito da sua validade e imprescindibilidade para as bases da mecânica estatística de equilíbrio [3]. São necessárias ainda investigações físicas e matemáticas mais profundas para preencher essa lacuna teórica.

Muitos dos fenômenos físicos de interesse – como transporte de energia num sistema sujeito a um gradiente de temperatura – envolvem processos irreversíveis fora do equilíbrio. Até o momento, não é conhecido um formalismo exato que se aplique, de modo geral e satisfatório, à mecânica estatística de não equilíbrio [6]. Isto posto, esse ramo da mecânica estatística permanece uma área ativa de pesquisa nos dias atuais. Como exemplo, a dedução da lei de Fourier sobre a condução de calor por primeiros princípios é um problema em aberto. Essa ainda é uma lei fenomenológica [7], e, apesar de válida para diversos sistemas físicos conhecidos, as condições precisas para a sua validade são, até então, incógnitas. Enunciada no ano de 1822 por Jean-Baptiste Joseph Fourier no trabalho *Théorie analytique de la chaleur*, a lei de Fourier estabelece que o fluxo de calor $\mathcal{F}(\mathbf{x}, t)$, no ponto \mathbf{x} e instante de tempo t , é proporcional ao gradiente de temperatura $\nabla T(\mathbf{x}, t)$ no sistema segundo a equação

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}, t) = -\kappa(T, \mathbf{x})\nabla T(\mathbf{x}, t)$$

A constante de proporcionalidade $\kappa(T, \mathbf{x})$ é chamada de condutividade térmica.

O esforço empregado na busca pelas condições precisas para a validade da lei de Fourier, a partir do estudo de modelos simplificados, levou à descoberta de múltiplas propriedades da condução de calor, algumas com promissoras aplicações experimentais. Uma delas é a existência de retificação térmica [8], fenômeno pelo qual a magnitude do fluxo de calor depende do seu sentido. Em um dado material situado entre dois reservatórios térmicos, por exemplo, diz-se que há retificação quando o módulo da magnitude do fluxo de calor muda ao se inverterm os reservatórios. A retificação térmica é o ingrediente cardinal na concepção de dispositivos como diodos térmicos, já propostos e, inclusive, construídos na prática [9]. Materiais com estrutura *graded* – isto é, materiais cuja estrutura varia gradualmente no espaço – e interações intrincadas (e.g., anarmônicas) são fortes candidatos à construção desses dispositivos [10], motivando o desenvolvimento de diversos trabalhos, tanto teóricos quanto experimentais, com o propósito de estudar suas propriedades. Além de abundantes na natureza, com o avanço da nanotecnologia e das técnicas experimentais relacionadas, esses materiais podem ser fabricados e manipulados quanto às especificidades de suas estruturas. O estudo da retificação do fluxo de energia num sistema quântico *graded* é a proposta central deste trabalho.

Na mecânica quântica, o estado de um sistema físico fechado – por definição, um sistema que não troca matéria ou energia com outro sistema¹ – é descrito por um vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ que evolui no tempo de acordo com a equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

$H(t)$ é o Hamiltoniano do sistema.

Dado um vetor de estado inicial no instante $t = t_0$, a solução dessa equação pode ser expressa formalmente por meio de um operador de evolução temporal:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

Da hermiticidade de $H(t)$ ($H = H^\dagger$), segue que $U(t, t_0)$ é unitário ($U^\dagger = U^{-1}$). A hermiticidade é exigida para todo operador associado a uma variável dinâmica a fim de garantir a existência de uma representação espectral do operador: a existência dessa representação é essencial à formulação da teoria quântica [11]. É, ademais, característico de um operador hermitiano ter autovalores reais.

¹ Faz-se necessário pontuar aqui que um sistema quântico que troca matéria ou energia com um sistema clássico de uma maneira conhecida, como o pulso de um *laser* sobre um átomo, é também considerado fechado.

Em contraste com o caso de um sistema fechado, a dinâmica de um sistema aberto – isto é, um sistema que interage com um sistema quântico externo – não pode, em geral, ser descrita em termos de uma evolução temporal unitária [12]. Com efeito, nenhum sistema pode ser completamente isolado do ambiente externo, e todo sistema quântico realista deve ser tratado como um sistema aberto. Em muitos casos, mostra-se útil formular a dinâmica de um sistema aberto por meio de uma equação de movimento apropriada para o seu operador de estado, uma equação mestre quântica. O nome “equação mestre” se deve a Nordsieck, Lamb e Uhlenbeck. Esse termo foi utilizado pela primeira vez (em um contexto clássico) no artigo *On the theory of cosmic-ray showers I: the furry model and the fluctuation problem*², de autoria deles, em que se lê: “When the probabilities of the elementary processes are known, one can write down a continuity equation for W [a set of probabilities], from which all other equations can be derived and which we will call therefore the ‘master’ equation.” Uma equação amplamente utilizada para descrever a evolução não unitária do operador de estado de um sistema aberto é a equação de Lindblad [12]. Suas premissas são a homogeneidade do tempo e a validade da condição de Markov (um processo que satisfaz à condição de Markov é aquele cuja distribuição de probabilidade condicional dos estados futuros depende apenas do estado atual – e não da sequência de eventos precedentes). Sua forma mais geral para um sistema aberto de Hamiltoniano H e cujo estado é descrito por um operador de estado ρ é:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H, \rho] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k (A_k \rho A_k^\dagger - \frac{1}{2} A_k^\dagger A_k \rho - \frac{1}{2} \rho A_k A_k^\dagger)$$

N é a dimensão do espaço de Hilbert do sistema. Os operadores A_k são comumente chamados de operadores de Lindblad, e os coeficientes γ_k são dados em termos de certas funções de correlação do ambiente.

Nesta dissertação, estuda-se o sistema quântico aberto unidimensional constituído de uma cadeia de spin XXZ com N sítios (partículas de spin $\frac{1}{2}$) sujeita a um reservatório de spin em cada extremidade e a um campo magnético externo B . A evolução temporal do operador de estado ρ do sistema é modelada por uma equação do tipo Lindblad [13]:

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + D_L(\rho) + D_R(\rho),$$

em que

² NORDSIECK, A.; LAMB, W.; UHLENBECK, G. On the theory of cosmic-ray showers I: the furry model and the fluctuation problem. *Physica*, v. 7, p. 344-360, abr. 1940.

$$D_{L,R}(\rho) = \sum_{s=\pm} L_s^{(L,R)} \rho L_s^{(L,R)\dagger} - \frac{1}{2} \{L_s^{(L,R)} L_s^{(L,R)\dagger}, \rho\}, \quad L_{\pm}^{(L,R)} = \sqrt{\frac{\gamma}{2}} (1 \pm f_{L,R}) \sigma_{1,N}^{\pm}$$

$\sigma^{\pm} \equiv \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y)$, sendo $\sigma^{x,y,z}$ os operadores de spin de Pauli. Os parâmetros $f_{L,R}$ caracterizam os reservatórios.

Considera-se o Hamiltoniano para uma cadeia de spin com N sítios sujeita a um campo magnético externo da seguinte forma:

$$H = \sum_{i=1}^N B_i \sigma_i^z + \sum_{i=1}^{N-1} (J_{i,i+1}^x \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + J_{i,i+1}^y \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + J_{i,i+1}^z \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z),$$

Presumem-se condições de contorno abertas (não periódicas). O primeiro termo do Hamiltoniano é devido ao acoplamento do momento de dipolo magnético intrínseco dos spins ao campo magnético externo B (na direção z). O segundo, por sua vez, modela uma interação spin-spin de vizinho próximo, intitulada “interação de troca”. A interação de troca é um efeito quântico entre partículas idênticas que ocorre em virtude da sobreposição de suas funções de onda – sujeitas à simetria de troca. Usualmente, essa é uma interação de curtíssimo alcance. Assume-se, à vista disso, que as interações magnéticas ocorram apenas entre partículas adjacentes. Os termos $J^{x,y,z}$ são uma medida da intensidade dessa interação nas respectivas direções indicadas. No caso mais geral, o campo magnético externo e os termos $J^{x,y,z}$ podem assumir um valor para cada sítio ou par de sítios. O caso particular do Hamiltoniano em que $J^x = J^y$ recebe o nome de modelo XXZ, estudado nesta dissertação. Investiga-se o sistema com estrutura *graded* – isto é, variando gradualmente com i – tanto em J^x quanto em J^z . Inquirem-se, ainda, os efeitos do estabelecimento de um campo magnético *graded* no sistema.

Quando $f_L \neq f_R$, o sistema, eventualmente, evolui para um estado estacionário de não equilíbrio, caracterizado por um fluxo constante de magnetização $\langle J^M \rangle$ e um fluxo de energia $\langle J^E \rangle$ de um reservatório para o outro [13]. Se se inverterm os reservatórios e o sistema for simétrico, espera-se que o fluxo apenas mude de sentido, isto é, que se tenha $\langle J \rangle(f_L, f_R) = -\langle J \rangle(f_R, f_L)$.

$\langle J \rangle$ indica, genericamente, qualquer um dos fluxos – de energia ou magnetização. A ordem dos parâmetros indica a ordem dos reservatórios.

Se, no entanto, o sistema for assimétrico, pode-se ter $\langle J \rangle(f_L, f_R) \neq -\langle J \rangle(f_R, f_L)$. Nesse caso, diz-se que o sistema apresenta retificação. É possível que o sistema apresente retificação quanto a um fluxo e não apresente quanto ao outro.

O estudo do problema em uma dimensão é uma estratégia que, embora drástica à primeira vista, se provou bem-sucedida. Essa estratégia resume-se à construção de um modelo suficientemente simples, mas representativo, que englobe as características principais das propriedades de interesse do sistema – a abordagem de um Hamiltoniano de interação spin-spin genérico é um problema muito complexo, frequentemente fora do alcance de qualquer tratamento por teorias perturbativas. Conhece-se hoje uma quantidade formidável de materiais magnéticos cuja interação entre os diferentes constituintes se dá, essencialmente, ao longo de cadeias unidimensionais, enquanto a interação entre as cadeias é desprezível [14]. Modelos de cadeias de spin em uma dimensão descrevem satisfatoriamente as propriedades magnéticas desses materiais, e não estão, pois, confinados ao âmbito teórico. Além disso, o estudo da cadeia de spin XXZ em uma dimensão tem interesse por si só, sendo um modelo arquetípico para a investigação de sistemas quânticos abertos.

É interessante notar que a maior parte dos trabalhos [15-17] no estudo do mecanismo microscópico da condução de calor envolve modelos clássicos. A escassez de resultados quânticos torna o estudo detalhado do transporte de energia em modelos genuinamente quânticos algo de grande importância. O fenômeno de retificação térmica, por exemplo, foi observado na cadeia de osciladores harmônicos *graded* quântica com reservatórios estocásticos internos [10, 18], mas faz-se ausente na versão clássica do mesmo modelo [19, 20]. Já foi rigorosamente provado que não há retificação térmica em qualquer versão assimétrica desse modelo (clássico) [20], e esse é um exemplo terminante de que a mera existência de assimetria no sistema não garante a ocorrência de retificação. Uma candidata natural para um modelo quântico que descreve os fenômenos de transporte aqui investigados seria a versão quântica da cadeia de osciladores anarmônicos, mas mesmo sua versão clássica já é um problema de extrema dificuldade [21, 22].

São bem conhecidos na literatura resultados para os fluxos e para retificação em cadeias de spin com estrutura não *graded*, como [13, 23-25]. Há, porém, relativamente poucos estudos sobre retificação em sistemas *graded*, como [26, 27]. Busca-se, aqui, apresentar resultados para retificação ao se introduzir tal assimetria. Mostra-se que a existência de uma estrutura *graded* leva a uma modificação no fluxo de energia e, até mesmo, à retificação.

Analisam-se também os efeitos da introdução de um campo magnético *graded*, a fim de verificar se ele intensifica uma retificação existente no sistema ou, ainda, dá origem a uma nova. Exibem-se análises baseadas em propriedades de simetrias (ou de suas quebras), bem como resultados via cálculos diretos.

O restante da dissertação está organizado como se segue: no capítulo 2, estudam-se os fluxos de energia e magnetização, no estado estacionário, na cadeia de spin submetida a um campo magnético externo uniforme; no capítulo 3, estudam-se os mesmos fluxos na cadeia submetida a um campo magnético externo *graded*, e investigam-se alguns outros modelos da cadeia de spin; a conclusão se encontra no capítulo 4; no APÊNDICE A, apresenta-se uma derivação da forma particular da equação de Lindblad aqui utilizada pelo esquema de interações repetidas; no APÊNDICE B, por fim, deduz-se a forma explícita para o dissipador total da equação derivada no APÊNDICE A.

2 ANÁLISE DOS FLUXOS NA CADEIA SUBMETIDA A UM CAMPO MAGNÉTICO UNIFORME

Neste capítulo, estudam-se os fluxos de energia e magnetização, no estado estacionário, na cadeia de spin sujeita a um campo magnético externo uniforme. Analisam-se os casos de estrutura *graded* e não *graded* do parâmetro de anisotropia $J^z \equiv \Delta$. Apresentam-se resultados teóricos para os fluxos – via cálculos diretos e análises de simetria – e também soluções exatas, obtidas por meio do *software* Mathematica[®], para o caso $N = 3$.

2.1 Δ não *graded*

O sistema consiste em uma cadeia de spin XXZ com N sítios (partículas de spin $1/2$) sujeita a um reservatório de spin em cada extremidade e a um campo magnético externo uniforme B . O Hamiltoniano é dado por:

$$H = B \sum_{i=1}^N \sigma_i^z + \sum_{i=1}^{N-1} [\alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z] \quad (2.1)$$

Definiu-se $J^x = J^y \equiv \alpha$.

A dinâmica do sistema é modelada por uma equação do tipo Lindblad para o operador de estado ρ :

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + D_L(\rho) + D_R(\rho), \quad (2.2)$$

em que

$$D_{L,R}(\rho) = \sum_{s=\pm} L_s^{(L,R)} \rho L_s^{(L,R)\dagger} - \frac{1}{2} \{L_s^{(L,R)} L_s^{(L,R)\dagger}, \rho\}, \quad (2.3)$$

sendo

$$L_{\pm}^{(L,R)} = \sqrt{\frac{\gamma}{2}} (1 \pm f_{L,R}) \sigma_{1,N}^{\pm}, \quad \sigma^{\pm} \equiv \frac{1}{2} (\sigma^x \pm i\sigma^y)$$

Fez-se $\hbar = 1$ em (2.2). Os parâmetros $-1 \leq f_{L,R} \leq 1$ caracterizam os reservatórios. Eles podem ser interpretados como $f_L = \langle \sigma_0^z \rangle$ e $f_R = \langle \sigma_{N+1}^z \rangle$, em que os spins 0 e $N + 1$ não fazem parte da cadeia (ver APÊNDICE A). Desse modo, fixa-se a magnetização média nas fronteiras. $\gamma > 0$ é uma medida da intensidade do acoplamento aos reservatórios.

No APÊNDICE A, apresenta-se uma derivação da equação particular (2.2) pelo esquema de interações repetidas.

O dissipador total é dado por (ver APÊNDICE B):

$$\begin{aligned}
D(\rho) &= D_L(\rho) + D_R(\rho) \\
&= \frac{\gamma}{4} \{ (1 + f_L) [2\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - (\sigma_1^- \sigma_1^+ \rho + \rho \sigma_1^- \sigma_1^+)] \\
&\quad + (1 - f_L) [2\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - (\sigma_1^+ \sigma_1^- \rho + \rho \sigma_1^+ \sigma_1^-)] \\
&\quad + (1 + f_R) [2\sigma_N^+ \rho \sigma_N^- - (\sigma_N^- \sigma_N^+ \rho + \rho \sigma_N^- \sigma_N^+)] \\
&\quad + (1 - f_R) [2\sigma_N^- \rho \sigma_N^+ - (\sigma_N^+ \sigma_N^- \rho + \rho \sigma_N^+ \sigma_N^-)] \} \quad (2.4)
\end{aligned}$$

Quando $f_L = f_R$, o sistema evolui para um estado de equilíbrio num *ensemble* de temperatura fixa e magnetização variável. Quando $f_L \neq f_R$, no entanto, o sistema evolui para um estado estacionário de não equilíbrio (NESS¹), caracterizado por fluxos constantes de magnetização e energia de um reservatório para o outro. Demonstrar a unicidade do estado estacionário é uma tarefa complexa, da qual se furta aqui. Veja, por exemplo, [28]. Presume-se a existência e unicidade do NESS em todo este trabalho.

2.1.1 Cálculo do fluxo de magnetização

Para $f_L \neq f_R$, o fluxo de magnetização pode ser encontrado por meio da equação que governa a evolução temporal do valor esperado de σ_i^z . No modelo XXZ, a magnetização na direção z é conservada, e pode-se, pois, falar de fluxo de magnetização para a componente nessa direção. Por simplicidade, assumem-se parâmetros simétricos da forma $f_L = -f_R \equiv f$.

Examina-se, primeiramente, o caso $i = 1$. Utilizando-se a equação (2.2):

$$\frac{d\langle \sigma_1^z \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} (\text{Tr}(\rho \sigma_1^z)) = \text{Tr} \left(\frac{d\rho}{dt} \sigma_1^z \right) = -i \text{Tr}([H, \rho] \sigma_1^z) + \text{Tr}(D(\rho) \sigma_1^z)$$

¹ Do inglês, *Nonequilibrium Steady State*.

Utiliza-se aqui – e em todo o texto, doravante – a representação de Schrödinger, na qual a dependência temporal é carregada pelo operador de estado, enquanto as variáveis dinâmicas são independentes do tempo.

Considerando-se o primeiro termo do lado direito da equação anterior:

$$\begin{aligned} -iTr([H, \rho]\sigma_1^z) &= -iTr(H\rho\sigma_1^z - \rho H\sigma_1^z) = -iTr[\rho(\sigma_1^z H - H\sigma_1^z)] = -iTr(\rho[\sigma_1^z, H]) \\ &= i\langle [H, \sigma_1^z] \rangle \end{aligned}$$

Utilizou-se a propriedade de invariância do traço sob permutações cíclicas. Tem-se:

$$i\langle [H, \sigma_1^z] \rangle = i\alpha\langle [\sigma_1^x\sigma_2^x + \sigma_1^y\sigma_2^y, \sigma_1^z] \rangle = i\alpha\langle \sigma_1^x\sigma_1^z\sigma_2^x + \sigma_1^y\sigma_1^z\sigma_2^y - \sigma_1^z\sigma_1^x\sigma_2^x - \sigma_1^z\sigma_1^y\sigma_2^y \rangle$$

Os operadores de spin de Pauli satisfazem às seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} (\sigma^x)^2 &= (\sigma^y)^2 = (\sigma^z)^2 = 1 \\ \sigma^x\sigma^y &= -\sigma^y\sigma^x = i\sigma^z \\ \sigma^y\sigma^z &= -\sigma^z\sigma^y = i\sigma^x \\ \sigma^z\sigma^x &= -\sigma^x\sigma^z = i\sigma^y \end{aligned}$$

Utilizando-se essas propriedades:

$$i\langle [H, \sigma_1^z] \rangle = i\alpha\langle -i\sigma_1^y\sigma_2^x + i\sigma_1^x\sigma_2^y - i\sigma_1^y\sigma_2^x + i\sigma_1^x\sigma_2^y \rangle = -2\alpha\langle \sigma_1^x\sigma_2^y - \sigma_1^y\sigma_2^x \rangle$$

Considera-se agora o segundo termo:

$$\begin{aligned} Tr(D(\rho)\sigma_1^z) &= \frac{\gamma}{4}Tr\{(1+f)[2\sigma_1^+\rho\sigma_1^-\sigma_1^z - (\sigma_1^-\sigma_1^+\rho + \rho\sigma_1^-\sigma_1^+)\sigma_1^z] \\ &\quad + (1-f)[2\sigma_1^-\rho\sigma_1^+\sigma_1^z - (\sigma_1^+\sigma_1^-\rho + \rho\sigma_1^+\sigma_1^-)\sigma_1^z]\} \\ &= \frac{\gamma}{4}Tr[(1+f)(2\rho\sigma_1^-\sigma_1^z\sigma_1^+ - \rho\sigma_1^z\sigma_1^-\sigma_1^+ - \rho\sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_1^z) \\ &\quad + (1-f)(2\rho\sigma_1^+\sigma_1^z\sigma_1^- - \rho\sigma_1^z\sigma_1^+\sigma_1^- - \rho\sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_1^z)] \\ &= \frac{\gamma}{4}\langle (1+f)(2\sigma_1^-\sigma_1^z\sigma_1^+ - \sigma_1^z\sigma_1^-\sigma_1^+ - \sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_1^z) \\ &\quad + (1-f)(2\sigma_1^+\sigma_1^z\sigma_1^- - \sigma_1^z\sigma_1^+\sigma_1^- - \sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_1^z) \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\gamma}{4} \langle (1+f) \left[\frac{1}{2} (\sigma_1^x - i\sigma_1^y) \sigma_1^z (\sigma_1^x + i\sigma_1^y) - \frac{1}{4} \sigma_1^z (\sigma_1^x - i\sigma_1^y) (\sigma_1^x + i\sigma_1^y) - \frac{1}{4} (\sigma_1^x - i\sigma_1^y) (\sigma_1^x + i\sigma_1^y) \sigma_1^z \right] \right. \\
&\quad \left. + (1-f) \left[\frac{1}{2} (\sigma_1^x + i\sigma_1^y) \sigma_1^z (\sigma_1^x - i\sigma_1^y) - \frac{1}{4} \sigma_1^z (\sigma_1^x + i\sigma_1^y) (\sigma_1^x - i\sigma_1^y) - \frac{1}{4} (\sigma_1^x + i\sigma_1^y) (\sigma_1^x - i\sigma_1^y) \sigma_1^z \right] \right\rangle \\
&= \frac{\gamma}{4} \langle (1+f) \left[\frac{1}{2} (-i\sigma_1^y + \sigma_1^x) (\sigma_1^x + i\sigma_1^y) - \frac{1}{4} (i\sigma_1^y - \sigma_1^x) (\sigma_1^x + i\sigma_1^y) - \frac{1}{4} (\sigma_1^x - i\sigma_1^y) (-i\sigma_1^y - \sigma_1^x) \right] \right. \\
&\quad \left. + (1-f) \left[\frac{1}{2} (-i\sigma_1^y - \sigma_1^x) (\sigma_1^x - i\sigma_1^y) - \frac{1}{4} (i\sigma_1^y + \sigma_1^x) (\sigma_1^x - i\sigma_1^y) - \frac{1}{4} (\sigma_1^x + i\sigma_1^y) (-i\sigma_1^y + \sigma_1^x) \right] \right\rangle \\
&= \frac{\gamma}{4} \langle 2(1+f)(1 + i\sigma_1^x \sigma_1^y) + 2(1-f)(-1 + i\sigma_1^x \sigma_1^y) \rangle = \gamma(f - \langle \sigma_1^z \rangle)
\end{aligned}$$

Logo:

$$\frac{d\langle \sigma_1^z \rangle}{dt} = -2\alpha \langle \sigma_1^x \sigma_2^y - \sigma_1^y \sigma_2^x \rangle + \gamma(f - \langle \sigma_1^z \rangle) \quad (2.5)$$

Examina-se agora o caso $1 < i < N$:

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \sigma_i^z \rangle}{dt} &= -i \text{Tr}([H, \rho] \sigma_i^z) = i \langle [H, \sigma_i^z] \rangle = i\alpha \langle [\sigma_{i-1}^x \sigma_i^x + \sigma_{i-1}^y \sigma_i^y + \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y, \sigma_i^z] \rangle \\
&= i\alpha \langle \sigma_{i-1}^x \sigma_i^x \sigma_i^z + \sigma_{i-1}^y \sigma_i^y \sigma_i^z + \sigma_i^x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_i^z \sigma_{i+1}^y - \sigma_{i-1}^x \sigma_i^z \sigma_i^x - \sigma_{i-1}^y \sigma_i^z \sigma_i^y - \sigma_i^z \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \\
&\quad + \sigma_i^z \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \rangle \\
&= i\alpha \langle -i\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y + i\sigma_{i-1}^y \sigma_i^x - i\sigma_i^y \sigma_{i+1}^x + i\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - i\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y + i\sigma_{i-1}^y \sigma_i^x - i\sigma_i^y \sigma_{i+1}^x \\
&\quad + i\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y \rangle \\
&= 2\alpha \langle \sigma_{i-1}^x \sigma_i^y - \sigma_{i-1}^y \sigma_i^x \rangle - 2\alpha \langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x \rangle \quad (2.6)
\end{aligned}$$

Por fim, analisa-se o caso $i = N$:

$$\frac{d\langle \sigma_N^z \rangle}{dt} = -i \text{Tr}([H, \rho] \sigma_N^z) + \text{Tr}(D(\rho) \sigma_N^z)$$

Considerando-se o primeiro termo do lado direito dessa equação:

$$\begin{aligned}
-i\text{Tr}([H, \rho]\sigma_N^z) &= i\langle [H, \sigma_N^z] \rangle = i\alpha\langle [\sigma_{N-1}^x\sigma_N^x + \sigma_{N-1}^y\sigma_N^y, \sigma_N^z] \rangle \\
&= i\alpha\langle \sigma_{N-1}^x\sigma_N^x\sigma_N^z + \sigma_{N-1}^y\sigma_N^y\sigma_N^z - \sigma_{N-1}^x\sigma_N^x\sigma_N^z - \sigma_{N-1}^y\sigma_N^y\sigma_N^z \rangle \\
&= i\alpha\langle -i\sigma_{N-1}^x\sigma_N^y + i\sigma_{N-1}^y\sigma_N^x - i\sigma_{N-1}^x\sigma_N^y + i\sigma_{N-1}^y\sigma_N^x \rangle \\
&= 2\alpha\langle \sigma_{N-1}^x\sigma_N^y - \sigma_{N-1}^y\sigma_N^x \rangle
\end{aligned}$$

O cálculo do segundo termo é idêntico àquele para o caso $i = 1$, fazendo-se as correspondências $\sigma_1^{x,y,z} \rightarrow \sigma_N^{x,y,z}$ e $f \rightarrow -f$. Obtém-se:

$$\text{Tr}(D(\rho)\sigma_N^z) = -\gamma(f + \langle \sigma_N^z \rangle)$$

Assim:

$$\frac{d\langle \sigma_N^z \rangle}{dt} = 2\alpha\langle \sigma_{N-1}^x\sigma_N^y - \sigma_{N-1}^y\sigma_N^x \rangle - \gamma(f + \langle \sigma_N^z \rangle) \quad (2.7)$$

A equação de continuidade em uma dimensão, em sua versão discreta, é dada por:

$$\frac{dP_i}{dt} = \langle J_{i-1} \rangle - \langle J_i \rangle$$

P é alguma densidade associada à corrente $\langle J \rangle$.

Tomando-se $\langle \sigma_i^z \rangle$ como uma densidade de magnetização, tem-se:

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \sigma_1^z \rangle}{dt} &= \langle J_L^M \rangle - \langle J_1^M \rangle \\
\frac{d\langle \sigma_i^z \rangle}{dt} &= \langle J_{i-1}^M \rangle - \langle J_i^M \rangle, \quad 1 < i < N \\
\frac{d\langle \sigma_N^z \rangle}{dt} &= \langle J_{N-1}^M \rangle - \langle J_R^M \rangle
\end{aligned}$$

$\langle J_i^M \rangle$ é o fluxo de magnetização do sítio i em direção ao sítio $i + 1$. $\langle J_L^M \rangle$ e $\langle J_R^M \rangle$ são, respectivamente, o fluxo do reservatório esquerdo para o sistema e o fluxo do sistema para o reservatório direito.

Finalmente, à luz da equação de continuidade e das equações (2.5) a (2.7), definem-se os fluxos:

$$\langle J_i^M \rangle \equiv 2\alpha \langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x \rangle, 1 \leq i \leq N \quad (2.8)$$

$$\langle J_L^M \rangle \equiv \gamma(f - \langle \sigma_1^z \rangle) \quad (2.9)$$

$$\langle J_R^M \rangle \equiv -\gamma(f + \langle \sigma_N^z \rangle) \quad (2.10)$$

No estado estacionário, $d\langle \sigma_i^z \rangle / dt = 0 \forall i$, resultando num fluxo homogêneo através da cadeia:

$$\langle J_L^M \rangle_{NESS} = \langle J_1^M \rangle_{NESS} = \langle J_2^M \rangle_{NESS} = \dots = \langle J_N^M \rangle_{NESS} = \langle J_R^M \rangle_{NESS} \equiv \langle J^M \rangle$$

Conceitualmente, o fluxo de magnetização corresponde a excitações elementares num sistema de spin, as quais ocorrem em forma de ondas e podem ser quantizadas por meio de quase partículas denominadas mágnons (a excitação de um mágnon corresponde à inversão de um spin $1/2$). Essas ondas são análogas às vibrações numa estrutura cristalina, quantizadas por meio de fônons. Enquanto vibrações numa rede cristalina são oscilações das posições relativas dos átomos no cristal, ondas de spin são oscilações das orientações de spin relativas no sistema.

2.1.2 Cálculo do fluxo de energia

Primeiramente, reescreve-se o Hamiltoniano (2.1) da seguinte forma:

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} \varepsilon_{i,i+1} = \sum_{i=1}^{N-1} (h_{i,i+1} + b_{i,i+1}), \quad (2.11)$$

$$h_{i,i+1} \equiv \alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z, \quad (2.12)$$

$$b_{i,i+1} \equiv \frac{1}{2} B [\sigma_i^z (1 + \delta_{i,1}) + \sigma_{i+1}^z (1 + \delta_{i+1,N})] \quad (2.13)$$

O fluxo de energia, no qual se está interessado, é obtido por meio da taxa de variação temporal do valor esperado da densidade de energia local $\varepsilon_{i,i+1}$. Utilizando-se a equação (2.2):

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \varepsilon_{i,i+1} \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\text{Tr}(\rho \varepsilon_{i,i+1}) \right) = \text{Tr} \left(\frac{d\rho}{dt} \varepsilon_{i,i+1} \right) \\
&= -i \text{Tr}([H, \rho] \varepsilon_{i,i+1}) + \text{Tr}(D_L(\rho) \varepsilon_{i,i+1}) + \text{Tr}(D_R(\rho) \varepsilon_{i,i+1}) \\
&= i \langle [H, \varepsilon_{i,i+1}] \rangle + \text{Tr}(D_L(\rho) \varepsilon_{1,2}) \delta_{i,1} + \text{Tr}(D_R(\rho) \varepsilon_{N-1,N}) \delta_{i+1,N} \\
&= i \langle [\varepsilon_{i-1,i}, \varepsilon_{i,i+1}] \rangle \delta_{i,j \neq 1} + i \langle [\varepsilon_{i+1,i+2}, \varepsilon_{i,i+1}] \rangle \delta_{i+1,j \neq N} \\
&\quad + \text{Tr}(D_L(\rho) \varepsilon_{1,2}) \delta_{i,1} + \text{Tr}(D_R(\rho) \varepsilon_{N-1,N}) \delta_{i+1,N}, 1 \leq i < N \quad (2.14)
\end{aligned}$$

A equação de continuidade para o fluxo de energia, em cada par de sítios vizinhos, é dada por:

$$\frac{d\langle \varepsilon_{i,i+1} \rangle}{dt} = \langle J_i^E \rangle - \langle J_{i+1}^E \rangle, 1 \leq i < N$$

Comparando-se a equação de continuidade à equação (2.14), define-se:

$$\langle J_i^E \rangle \equiv i \langle [\varepsilon_{i-1,i}, \varepsilon_{i,i+1}] \rangle, 1 < i < N \quad (2.15)$$

Essa definição não se aplica às fronteiras da cadeia, caso em que o fluxo resulta da ação dos reservatórios. De modo a se ter uma definição consistente do fluxo de energia em todo o sistema, ainda à luz da equação (2.14), definem-se:

$$\langle J_1^E \rangle \equiv \text{Tr}(D_L(\rho) \varepsilon_{1,2}) \quad (2.16)$$

$$\langle J_N^E \rangle \equiv -\text{Tr}(D_R(\rho) \varepsilon_{N-1,N}) \quad (2.17)$$

$\langle J_i^E \rangle$ é o fluxo de energia do par de sítios $(i-1, i)$ em direção ao par de sítios $(i, i+1)$, $1 < i < N$. $\langle J_1^E \rangle$ é o fluxo de energia do reservatório esquerdo para o sistema, e $\langle J_N^E \rangle$, o fluxo de energia do sistema para o reservatório direito.

Com o intuito de melhor compreender as características do transporte de energia, separa-se o fluxo de energia na expressão (2.15) em duas contribuições, uma advinda apenas das interações de troca, $\langle J_i^{XXZ} \rangle$, e uma contribuição líquida devida ao campo magnético externo, $\langle J_i^B \rangle$, tais que $\langle J_i^E \rangle = \langle J_i^{XXZ} \rangle + \langle J_i^B \rangle$.

Examina-se a primeira contribuição:

$$\begin{aligned}
\langle J_i^{XXZ} \rangle &= i \langle [h_{i-1,i}, h_{i,i+1}] \rangle \\
&= i \langle [\alpha(\sigma_{i-1}^x \sigma_i^x + \sigma_{i-1}^y \sigma_i^y) + \Delta \sigma_{i-1}^z \sigma_i^z, \alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z] \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= i\langle \alpha[\alpha(\sigma_{i-1}^x \sigma_{i+1}^x - i\sigma_{i-1}^y \sigma_i^z \sigma_{i+1}^x + i\sigma_{i-1}^x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^y + \sigma_{i-1}^y \sigma_i^y) \\
&\quad + i\Delta(\sigma_{i-1}^z \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x - \sigma_{i-1}^z \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y)] \\
&\quad + \Delta[\alpha(-i\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y \sigma_{i+1}^z + i\sigma_{i-1}^y \sigma_i^x \sigma_{i+1}^z) + \Delta\sigma_{i-1}^z \sigma_{i+1}^z] \\
&\quad - \alpha[\alpha(\sigma_{i-1}^x \sigma_{i+1}^x - i\sigma_{i-1}^x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^y + i\sigma_{i-1}^y \sigma_i^z \sigma_{i+1}^x + \sigma_{i-1}^y \sigma_i^y) + i\Delta(\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y \sigma_{i+1}^z - \sigma_{i-1}^y \sigma_i^x \sigma_{i+1}^z)] \\
&\quad - \Delta[\alpha(-i\sigma_{i-1}^z \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x + i\sigma_{i-1}^z \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y) + \Delta\sigma_{i-1}^z \sigma_{i+1}^z] \rangle \\
&= 2\alpha\langle \alpha(\sigma_{i-1}^y \sigma_i^z \sigma_{i+1}^x - \sigma_{i-1}^x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^y) + \Delta(\sigma_{i-1}^z \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_{i-1}^y \sigma_i^x \sigma_{i+1}^z) \\
&\quad + \Delta(\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y \sigma_{i+1}^z - \sigma_{i-1}^z \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x) \rangle \tag{2.18}
\end{aligned}$$

Examina-se agora a segunda contribuição:

$$\begin{aligned}
\langle J_i^B \rangle &= i\langle [\varepsilon_{i-1,i}, \varepsilon_{i,i+1}] \rangle - i\langle [h_{i-1,i}, h_{i,i+1}] \rangle \\
&= i\langle [h_{i-1,i}, b_{i,i+1}] \rangle + i\langle [b_{i-1,i}, h_{i,i+1}] \rangle + i\langle [b_{i-1,i}, b_{i,i+1}] \rangle \\
&= i\left\langle \left[\alpha(\sigma_{i-1}^x \sigma_i^x + \sigma_{i-1}^y \sigma_i^y) + \Delta\sigma_{i-1}^z \sigma_i^z, \frac{1}{2}B[\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z(1 + \delta_{i+1,N})] \right] \right. \\
&\quad + \left[\frac{1}{2}B[\sigma_{i-1}^z(1 + \delta_{i-1,1}) + \sigma_i^z], \alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right] \\
&\quad \left. + \left[\frac{1}{2}B[\sigma_{i-1}^z(1 + \delta_{i-1,1}) + \sigma_i^z], \frac{1}{2}B[\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z(1 + \delta_{i+1,N})] \right] \right\rangle \\
&= i\left\langle \frac{1}{2}B\{\alpha(-i\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y + i\sigma_{i-1}^y \sigma_i^x) + \Delta\sigma_{i-1}^z + [\alpha(\sigma_{i-1}^x \sigma_i^x + \sigma_{i-1}^y \sigma_i^y) \right. \\
&\quad \left. + \Delta\sigma_{i-1}^z \sigma_i^z] \sigma_{i+1}^z(1 + \delta_{i+1,N}) \right. \\
&\quad \left. + \alpha(-i\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y + i\sigma_{i-1}^y \sigma_i^x) - \Delta\sigma_{i-1}^z - (1 + \delta_{i+1,N})\sigma_{i+1}^z[\alpha(\sigma_{i-1}^x \sigma_i^x + \sigma_{i-1}^y \sigma_i^y) + \Delta\sigma_{i-1}^z \sigma_i^z] \right\} \\
&\quad + \frac{1}{2}B\{(1 + \delta_{i-1,1})\sigma_{i-1}^z[\alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z] + \alpha(i\sigma_i^y \sigma_{i+1}^x - i\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y) + \Delta\sigma_{i+1}^z \\
&\quad - [\alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z] \sigma_{i-1}^z(1 + \delta_{i-1,1}) + \alpha(i\sigma_i^y \sigma_{i+1}^x - i\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y) - \Delta\sigma_{i+1}^z \} \\
&\quad + \frac{1}{4}B^2[(1 + \delta_{i-1,1})\sigma_{i-1}^z \sigma_i^z + (1 + \delta_{i-1,1})(1 + \delta_{i+1,N})\sigma_{i-1}^z \sigma_{i+1}^z + 1 + \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z(1 + \delta_{i+1,N}) \\
&\quad - (1 + \delta_{i-1,1})\sigma_{i-1}^z \sigma_i^z - (1 + \delta_{i-1,1})(1 + \delta_{i+1,N})\sigma_{i-1}^z \sigma_{i+1}^z - 1 - \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z(1 + \delta_{i+1,N})]
\end{aligned}$$

$$= B\alpha\langle(\sigma_{i-1}^x\sigma_i^y - \sigma_{i-1}^y\sigma_i^x) + (\sigma_i^x\sigma_{i+1}^y - \sigma_i^y\sigma_{i+1}^x)\rangle$$

Utilizando-se a definição (2.8):

$$\langle J_i^B \rangle = \frac{1}{2}B\langle J_{i-1}^M + J_i^M \rangle \quad (2.19)$$

Definem-se contribuições similares nas fronteiras. Para o sítio $i = 1$, a primeira contribuição é dada por:

$$\begin{aligned} \langle J_1^{XXZ} \rangle &= Tr(D_L(\rho)h_{1,2}) \\ &= Tr\left\{\left[\alpha(\sigma_1^x\sigma_2^x + \sigma_1^y\sigma_2^y) + \Delta\sigma_1^z\sigma_2^z\right]\frac{\gamma}{4}\left[(1+f)[2\sigma_1^+\rho\sigma_1^- - (\sigma_1^-\sigma_1^+\rho + \rho\sigma_1^-\sigma_1^+)]\right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (1-f)[2\sigma_1^-\rho\sigma_1^+ - (\sigma_1^+\sigma_1^-\rho + \rho\sigma_1^+\sigma_1^-)]\right]\right\} \\ &= \frac{\gamma}{4}Tr\left[(1+f)(2\sigma_1^-\sigma_1^x\sigma_1^+\sigma_2^x\rho - \sigma_1^x\sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_2^x\rho - \sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_1^x\sigma_2^x\rho + 2\sigma_1^-\sigma_1^y\sigma_1^+\sigma_2^y\rho \right. \\ &\quad \left. - \sigma_1^y\sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_2^y\rho - \sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_1^y\sigma_2^y\rho) + (1-f)(2\sigma_1^-\rho\sigma_1^+ - \sigma_1^+\sigma_1^-\rho - \rho\sigma_1^+\sigma_1^-)\right] \\ &= \frac{\gamma}{4}Tr\left\{(1+f)\left[\alpha(2\sigma_1^-\sigma_1^x\sigma_1^+\sigma_2^x\rho - \sigma_1^x\sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_2^x\rho - \sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_1^x\sigma_2^x\rho + 2\sigma_1^-\sigma_1^y\sigma_1^+\sigma_2^y\rho \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sigma_1^y\sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_2^y\rho - \sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_1^y\sigma_2^y\rho) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \Delta(2\sigma_1^-\sigma_1^z\sigma_1^+\sigma_2^z\rho - \sigma_1^z\sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_2^z\rho - \sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_1^z\sigma_2^z\rho)\right]\right\} \\ &+ (1-f)\left[\alpha(2\sigma_1^+\sigma_1^x\sigma_1^-\sigma_2^x\rho - \sigma_1^x\sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_2^x\rho - \sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_1^x\sigma_2^x\rho + 2\sigma_1^+\sigma_1^y\sigma_1^-\sigma_2^y\rho - \sigma_1^y\sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_2^y\rho \right. \\ &\quad \left. - \sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_1^y\sigma_2^y\rho) + \Delta(2\sigma_1^+\sigma_1^z\sigma_1^-\sigma_2^z\rho - \sigma_1^z\sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_2^z\rho - \sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_1^z\sigma_2^z\rho)\right]\} \\ &= \frac{\gamma}{4}\langle(1+f)\left[\alpha(2\sigma_1^-\sigma_1^x\sigma_1^+\sigma_2^x - \sigma_1^x\sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_2^x - \sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_1^x\sigma_2^x + 2\sigma_1^-\sigma_1^y\sigma_1^+\sigma_2^y - \sigma_1^y\sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_2^y \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_1^y\sigma_2^y) + \Delta(2\sigma_1^-\sigma_1^z\sigma_1^+\sigma_2^z - \sigma_1^z\sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_2^z - \sigma_1^-\sigma_1^+\sigma_1^z\sigma_2^z)\right]\right. \\ &\quad \left. + (1-f)\left[\alpha(2\sigma_1^+\sigma_1^x\sigma_1^-\sigma_2^x - \sigma_1^x\sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_2^x - \sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_1^x\sigma_2^x + 2\sigma_1^+\sigma_1^y\sigma_1^-\sigma_2^y - \sigma_1^y\sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_2^y \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_1^y\sigma_2^y) + \Delta(2\sigma_1^+\sigma_1^z\sigma_1^-\sigma_2^z - \sigma_1^z\sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_2^z - \sigma_1^+\sigma_1^-\sigma_1^z\sigma_2^z)\right]\right\rangle \end{aligned}$$

Utilizam-se agora os seguintes resultados (facilmente demonstráveis):

$$\sigma^{\mp}\sigma^{x,y}\sigma^{\pm} = 0$$

$$\sigma^x\sigma^{\mp}\sigma^{\pm} = \sigma^{\pm}$$

$$\sigma^{\mp}\sigma^{\pm}\sigma^x = \sigma^{\mp}$$

$$\sigma^y \sigma^\mp \sigma^\pm = \mp i \sigma^\pm$$

$$\sigma^\mp \sigma^\pm \sigma^y = \pm i \sigma^\mp$$

$$\sigma^\mp \sigma^z \sigma^\pm = -\frac{1}{2}(\sigma^z \mp 1)$$

$$\sigma^z \sigma^\mp \sigma^\pm = \sigma^\mp \sigma^\pm \sigma^z = \frac{1}{2}(\sigma^z \mp 1)$$

Tem-se:

$$\begin{aligned} \langle J_1^{XXZ} \rangle &= \frac{\gamma}{4} \langle (1+f) \left\{ \alpha(-\sigma_1^+ \sigma_2^x - \sigma_1^- \sigma_2^x + i\sigma_1^+ \sigma_2^y - i\sigma_1^- \sigma_2^y) + \Delta[(1 - \sigma_1^z) \sigma_2^z \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2}(\sigma_1^z - 1) \sigma_2^z - \frac{1}{2}(\sigma_1^z - 1) \sigma_2^z] \right\} \\ &+ (1-f) \left\{ \alpha(-\sigma_1^- \sigma_2^x - \sigma_1^+ \sigma_2^x - i\sigma_1^- \sigma_2^y + i\sigma_1^+ \sigma_2^y) - \Delta[(\sigma_1^z + 1) \sigma_2^z + \frac{1}{2}(\sigma_1^z + 1) \sigma_2^z \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}(\sigma_1^z + 1) \sigma_2^z] \right\} \rangle \\ &= \frac{\gamma}{4} \langle \alpha(-2\sigma_1^x \sigma_2^x - 2\sigma_1^y \sigma_2^y) + \Delta(-4\sigma_1^z \sigma_2^z + 4f\sigma_2^z) \rangle \\ &= \frac{\gamma}{4} \langle -2[\alpha(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + \Delta\sigma_1^z \sigma_2^z] + \Delta(-2\sigma_1^z \sigma_2^z + 4f\sigma_2^z) \rangle \\ &= -\frac{\gamma}{2} (\langle h_{1,2} \rangle + \Delta\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle) + \gamma f \Delta\langle \sigma_2^z \rangle \end{aligned} \quad (2.20)$$

A segunda contribuição, por sua vez, é dada por:

$$\begin{aligned} \langle J_1^B \rangle &= Tr(D_L(\rho) b_{1,2}) \\ &= Tr \left\{ \frac{1}{2} B(2\sigma_1^z + \sigma_2^z) \frac{\gamma}{4} [(1+f)[2\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - (\sigma_1^- \sigma_1^+ \rho + \rho \sigma_1^- \sigma_1^+)] \right. \\ &\quad \left. + (1-f)[2\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - (\sigma_1^+ \sigma_1^- \rho + \rho \sigma_1^+ \sigma_1^-)] \right\} \\ &= \frac{1}{8} \gamma B Tr[(1+f)(4\sigma_1^- \sigma_1^z \sigma_1^+ \rho - 2\sigma_1^z \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho - 2\sigma_1^- \sigma_1^+ \sigma_1^z \rho + 2\sigma_1^- \sigma_1^+ \sigma_2^z \rho - \sigma_1^- \sigma_1^+ \sigma_2^z \rho \\ &\quad - \sigma_1^- \sigma_1^+ \sigma_2^z \rho) + (1-f)(4\sigma_1^+ \sigma_1^z \sigma_1^- \rho - 2\sigma_1^z \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho - 2\sigma_1^+ \sigma_1^- \sigma_1^z \rho \\ &\quad + 2\sigma_1^+ \sigma_1^- \sigma_2^z \rho - \sigma_1^+ \sigma_1^- \sigma_2^z \rho - \sigma_1^+ \sigma_1^- \sigma_2^z \rho)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{8} \gamma B \langle (1+f)(-4\sigma_1^z + 4) + (1-f)(-4\sigma_1^z - 4) \rangle \\
&= \gamma B (f - \langle \sigma_1^z \rangle) \tag{2.21}
\end{aligned}$$

Utilizaram-se, mais uma vez, os resultados para os operadores de spin de Pauli citados nas páginas anteriores.

Os cálculos para o sítio $i = N$ são inteiramente análogos. Os resultados seguem abaixo:

$$\langle J_N^{XXZ} \rangle = -\text{Tr}(D_L(\rho)h_{N-1,N}) = \frac{\gamma}{2} (\langle h_{N-1,N} \rangle + \Delta \langle \sigma_{N-1}^z \sigma_N^z \rangle) - \gamma f \Delta \langle \sigma_{N-1}^z \rangle \tag{2.22}$$

$$\langle J_N^B \rangle = -\gamma B (f + \langle \sigma_N^z \rangle) \tag{2.23}$$

No estado estacionário, $d\langle \varepsilon_{i,i+1} \rangle / dt = 0 \forall i$, resultando num fluxo homogêneo através da cadeia:

$$\langle J_1^E \rangle_{NESS} = \langle J_2^E \rangle_{NESS} = \dots = \langle J_N^E \rangle_{NESS} \equiv \langle J^E \rangle$$

Tem-se tratado, ao longo de todo o texto, de “fluxo de energia”, e não “fluxo de calor”. Utiliza-se essa terminologia, a qual se julga mais adequada, porque os reservatórios do sistema estudado não podem ser considerados, rigorosamente, reservatórios térmicos – fixa-se neles a magnetização média, e não a temperatura, parâmetro que sequer é mencionado aqui. Isto posto, não há garantia estrita acerca das formas de energia que fluem pelo sistema (e de calor ser a única delas). Por essa razão, atém-se ao termo mais genérico.

2.1.3 Análise de simetria

Caso o campo magnético externo seja nulo, sabe-se, *a posteriori*, que não há fluxo de energia no sistema, apesar de haver um fluxo de magnetização finito. A ausência de um fluxo de energia para $B = 0$ pode ser demonstrada considerando-se as simetrias da equação de Lindblad com Hamiltoniano do tipo XXZ.

Denota-se o lado direito da equação de Lindblad (2.2) por $\mathcal{L}[\rho]$. Caso ele seja invariante sob uma transformação unitária U – i.e., $\mathcal{L}[U\rho U^\dagger] = U\mathcal{L}[\rho]U^\dagger$ –, segue que $\tilde{\rho}(t) = U\rho(t)U^\dagger$ é uma nova solução da equação. Em geral, as soluções $\rho(t)$ e $\tilde{\rho}(t)$ descrevem evoluções temporais distintas. Caso, porém, o estado estacionário do sistema seja único, as

trajetórias $\rho(t)$ e $\tilde{\rho}(t)$ convergem, eventualmente, para a mesma solução assintótica $\rho_{NESS} = \lim_{t \rightarrow \infty} \rho(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{\rho}(t)$. Por conseguinte, a solução de estado estacionário única do sistema deve ser invariante sob a transformação U : $\rho_{NESS} = U\rho_{NESS}U^\dagger$.

No caso $B = 0$, não é difícil verificar que a equação de Lindblad (com $f_L = -f_R = f$) é invariante sob a transformação $U = \Omega^\beta R$ [23, 24], em que $\Omega^\beta = (\sigma^\beta)^{\otimes N} = \sigma_1^\beta \otimes \sigma_2^\beta \otimes \dots \otimes \sigma_N^\beta$, $\beta = x, y$, e R é um operador de reflexão direita-esquerda, tal que $R(A_1 \otimes B_2 \otimes \dots \otimes C_N) = (C_1 \otimes \dots \otimes B_{N-1} \otimes A_N)R$. Isso significa que o estado estacionário único do sistema também deve ser invariante sob essa transformação, e deve-se ter $\rho = U\rho U^\dagger = \Omega^\beta R\rho R\Omega^\beta$ (sendo $R = R^\dagger$ e $\Omega^\beta = \Omega^{\beta^\dagger}$).

Estuda-se como os operadores J_i^{XXZ} e J_i^M comportam-se sob a transformação U . Para J_i^{XXZ} :

$$\begin{aligned}
U^\dagger J_i^{XXZ} U &= R\Omega^x J_i^{XXZ} \Omega^x R \\
&= R\sigma_1^x \sigma_2^x \dots \sigma_{i-1}^x \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \dots \sigma_N^x \{2\alpha[\alpha(\sigma_{i-1}^y \sigma_i^z \sigma_{i+1}^x - \sigma_{i-1}^x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^y) \\
&\quad + \Delta(\sigma_{i-1}^z \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_{i-1}^y \sigma_i^x \sigma_{i+1}^z) \\
&\quad + \Delta(\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y \sigma_{i+1}^z - \sigma_{i-1}^z \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x)]\} \sigma_1^x \sigma_2^x \dots \sigma_{i-1}^x \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \dots \sigma_N^x R \\
&= 2\alpha R\{\alpha[(-\sigma_{i-1}^y)(-\sigma_i^z)\sigma_{i+1}^x - \sigma_{i-1}^x(-\sigma_i^z)(-\sigma_{i+1}^y)] \\
&\quad + \Delta[(-\sigma_{i-1}^z)\sigma_i^x(-\sigma_{i+1}^y) \\
&\quad - (-\sigma_{i-1}^y)\sigma_i^x(-\sigma_{i+1}^z)] + \Delta[\sigma_{i-1}^x(-\sigma_i^y)(-\sigma_{i+1}^z) - (-\sigma_{i-1}^z)(-\sigma_i^y)\sigma_{i+1}^x]\} R \\
&= 2\alpha R[\alpha(\sigma_{i-1}^y \sigma_i^z \sigma_{i+1}^x - \sigma_{i-1}^x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^y) + \Delta(\sigma_{i-1}^z \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_{i-1}^y \sigma_i^x \sigma_{i+1}^z) \\
&\quad + \Delta(\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y \sigma_{i+1}^z - \sigma_{i-1}^z \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x)] R \\
&= 2\alpha[\alpha(\sigma_{N-i}^x \sigma_{N-i+1}^z \sigma_{N-i+2}^y - \sigma_{N-i}^y \sigma_{N-i+1}^z \sigma_{N-i+2}^x) \\
&\quad + \Delta(\sigma_{N-i}^y \sigma_{N-i+1}^x \sigma_{N-i+2}^z - \sigma_{N-i}^z \sigma_{N-i+1}^x \sigma_{N-i+2}^y) \\
&\quad + \Delta(\sigma_{N-i}^z \sigma_{N-i+1}^y \sigma_{N-i+2}^x - \sigma_{N-i}^x \sigma_{N-i+1}^y \sigma_{N-i+2}^z)] R^2 \\
&= -2\alpha[\alpha(\sigma_{N-i}^y \sigma_{N-i+1}^z \sigma_{N-i+2}^x - \sigma_{N-i}^x \sigma_{N-i+1}^z \sigma_{N-i+2}^y) \\
&\quad + \Delta(\sigma_{N-i}^z \sigma_{N-i+1}^x \sigma_{N-i+2}^y - \sigma_{N-i}^y \sigma_{N-i+1}^x \sigma_{N-i+2}^z) \\
&\quad + \Delta(\sigma_{N-i}^x \sigma_{N-i+1}^y \sigma_{N-i+2}^z - \sigma_{N-i}^z \sigma_{N-i+1}^y \sigma_{N-i+2}^x)],
\end{aligned}$$

já que $R^2 = I$ ($R = R^\dagger = R^{-1}$).

Operadores são definidos por suas ações em seus espaços vetoriais. Para um estado qualquer $|s\rangle = |s_1^{(a_1)}\rangle \otimes |s_2^{(a_2)}\rangle \otimes \dots \otimes |s_N^{(a_N)}\rangle$:

$$(U^\dagger J_i^{XXZ} U)|s\rangle = -J_i^{XXZ}|s\rangle$$

Portanto:

$$U^\dagger J_i^{XXZ} U = -J_i^{XXZ}, 1 < i < N \quad (2.24)$$

Para J_i^M :

$$\begin{aligned} U^\dagger J_i^M U &= R \Omega^x J_i^M \Omega^x R \\ &= R \sigma_1^x \sigma_2^x \dots \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \dots \sigma_N^x [2\alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x)] \sigma_1^x \sigma_2^x \dots \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \dots \sigma_N^x R \\ &= 2\alpha R [\sigma_i^x (-\sigma_{i+1}^y) - (-\sigma_i^y) \sigma_{i+1}^x] R = 2\alpha R (-\sigma_i^x \sigma_{i+1}^y + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x) R \\ &= 2\alpha (-\sigma_{N-i}^y \sigma_{N-i+1}^x + \sigma_{N-i}^x \sigma_{N-i+1}^y) R^2 \\ &= 2\alpha (\sigma_{N-i}^x \sigma_{N-i+1}^y - \sigma_{N-i}^y \sigma_{N-i+1}^x) \end{aligned}$$

Tem-se que:

$$(U^\dagger J_i^M U)|s\rangle = J_i^M |s\rangle$$

Logo:

$$U^\dagger J_i^M U = J_i^M, 1 \leq i \leq N \quad (2.25)$$

Os cálculos são inteiramente análogos para $\beta = y$.

De (2.24), segue que:

$$\begin{aligned} \langle J_i^{XXZ} \rangle &= \text{Tr}(\rho J_i^{XXZ}) = \text{Tr}(U \rho U^\dagger J_i^{XXZ}) = \text{Tr}(\rho U^\dagger J_i^{XXZ} U) = -\text{Tr}(\rho J_i^{XXZ}) = -\langle J_i^{XXZ} \rangle \\ &\Rightarrow \langle J_i^{XXZ} \rangle = 0 \end{aligned} \quad (2.26)$$

Nesse caso ($B = 0$), então, por simetria, a componente XXZ deve ser nula no estado estacionário. Como $\langle J_i^B \rangle = 0 \forall i$ quando $B = 0$, ambas as componentes do fluxo de energia são nulas, e $\langle J^E \rangle = 0$.

De (2.25):

$$\langle J_i^M \rangle = \text{Tr}(\rho J_i^M) = \text{Tr}(U \rho U^\dagger J_i^M) = \text{Tr}(\rho U^\dagger J_i^M U) = \text{Tr}(\rho J_i^M) = \langle J_i^M \rangle \quad (2.27)$$

O operador J_i^M é invariante sob a transformação considerada, e o fluxo de magnetização não é suprimido por simetria. A análise de simetria não revela informação nova alguma a respeito desse fluxo.

A presença de um campo magnético externo uniforme $B > 0$ (caso deste capítulo) não afeta o fluxo de magnetização nem a componente XXZ do fluxo de energia. O efeito do campo magnético é variar a energia relativa dos setores de spin “para cima” e “para baixo”, deixando a estrutura interna de cada setor inalterada, o que não afeta o transporte de spin. Quanto à componente XXZ do fluxo de energia, isso pode ser visto reescrevendo-se a expressão (2.18) em termos de σ^\pm . O primeiro termo, por exemplo, é:

$$\sigma_{i-1}^y \sigma_i^z \sigma_{i+1}^x - \sigma_{i-1}^x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^y = 2i(\sigma_{i-1}^- \sigma_i^z \sigma_{i+1}^+ - \sigma_{i-1}^+ \sigma_i^z \sigma_{i+1}^-)$$

Esses termos são *spin-conserving*, de sorte que somente envolvem processos dentro de cada setor de spin $(i-1, i, i+1)$ separadamente. Pensando-se em σ^\pm como operadores criação/destruição de excitação de spin, dentro de um mesmo setor, o número de excitações é conservado. De fato, os efeitos da ação desses operadores sobre os estados de spin “para cima” e “para baixo” são:

$$\sigma^+ |\uparrow\rangle = \sigma^+ \left| s = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\sigma^+ |\downarrow\rangle = \sigma^+ \left| s = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle$$

$$\sigma^- |\uparrow\rangle = \sigma^- \left| s = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$$

$$\sigma^- |\downarrow\rangle = \sigma^- \left| s = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

Um campo magnético uniforme não afeta valores esperados de operadores como J_i^{XXZ} , já que a energia devida ao acoplamento de um spin paralelo ao campo é igual a menos a energia devida ao acoplamento de um spin antiparalelo a ele. Nesse caso, pois, tem-se ainda $\langle J_i^{XXZ} \rangle = 0$. A componente B do fluxo de energia não é mais nula, e, de acordo com a expressão (2.19):

$$\langle J^E \rangle = \langle J_i^B \rangle_{NESS} = \frac{1}{2} B \langle J_{i-1}^M + J_i^M \rangle_{NESS} = B \langle J^M \rangle \quad (2.28)$$

2.1.4 Soluções exatas para $N = 3$

Está-se interessado na solução de estado estacionário ρ^* da equação (2.2), obtida tomando-se $d\rho^*/dt = 0$. Escreve-se essa equação como:

$$\mathcal{W}(\rho^*) = -i[H, \rho^*] + D(\rho^*) = 0$$

Para computar o estado estacionário, deve-se, pois, encontrar o núcleo do operador linear \mathcal{W} .

Introduz-se, por conveniência, a operação vec , que converte uma matriz num vetor coluna. Seja \mathbb{F} um campo (como \mathbb{R} ou \mathbb{C}) e $A = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n) \in \mathbb{F}^{m \times n}$, em que $\mathbf{a}_j \in \mathbb{F}^m$, $j = 1, 2, \dots, n$. Define-se:

$$vec(A) \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n \end{pmatrix} \in \mathbb{F}^{m \cdot n}$$

Para quaisquer matrizes $A \in \mathbb{F}^{m \times n}$, $B \in \mathbb{F}^{n \times p}$ e $C \in \mathbb{F}^{p \times q}$, a seguinte identidade pode ser diretamente verificada:

$$vec(ABC) = (C^T \otimes A)vec(B)$$

O símbolo \otimes denota o produto de Kronecker. Para duas matrizes $M \in \mathbb{F}^{m \times n}$ e $N \in \mathbb{F}^{p \times q}$, esse produto é definido como:

$$M \otimes N \equiv (m_{ij}N) = \begin{pmatrix} m_{11}N & m_{12}N & \cdots & m_{1n}N \\ m_{21}N & m_{22}N & \cdots & m_{2n}N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{m1}N & m_{m2}N & \cdots & m_{mn}N \end{pmatrix} \in \mathbb{F}^{(m \cdot p) \times (n \cdot q)}$$

Todos os operadores que aparecem na equação de Lindblad (2.2) têm o formato $A\rho C$. Definindo-se $|\rho\rangle \equiv vec(\rho)$ e utilizando-se a identidade acima, podem-se escrever:

$$vec(A\rho C) = (C^T \otimes A)|\rho\rangle$$

$$vec(A\rho) = vec(A\rho I) = (I \otimes A)|\rho\rangle$$

$$vec(\rho C) = vec(I\rho C) = (C^T \otimes I)|\rho\rangle$$

$|\rho\rangle$ tem comprimento $d^2 = 2^{2N}$, e I é a matriz identidade de dimensão d .

Utilizando-se esses resultados e o fato de que vec é um operador linear, pode-se escrever a equação de Lindblad como:

$$\frac{d|\rho\rangle}{dt} = W|\rho\rangle \quad (2.29)$$

A matriz W tem dimensão $d^2 = 2^{2N}$ e é dada por:

$$\begin{aligned} W = & -i(I \otimes H - H \otimes I) \\ & + \frac{\gamma}{4} \{ (1+f)[2(\sigma_1^+ \otimes \sigma_1^+ + \sigma_N^- \otimes \sigma_N^-) \\ & - (I \otimes \sigma_1^- \sigma_1^+ + \sigma_1^- \sigma_1^+ \otimes I + I \otimes \sigma_N^+ \sigma_N^- + \sigma_N^+ \sigma_N^- \otimes I)] \\ & + (1-f)[2(\sigma_1^- \otimes \sigma_1^- + \sigma_N^+ \otimes \sigma_N^+) \\ & - (I \otimes \sigma_1^+ \sigma_1^- + \sigma_1^+ \sigma_1^- \otimes I + I \otimes \sigma_N^- \sigma_N^+ + \sigma_N^- \sigma_N^+ \otimes I)] \} \end{aligned}$$

A solução formal da equação (2.29) é:

$$|\rho(t)\rangle = e^{Wt}|\rho(0)\rangle$$

Denotam-se por $|x_k\rangle$ e $\langle y_k|$ os autovetores normalizados de W à direita e à esquerda, respectivamente, com autovalor λ_k , ou seja:

$$W|x_k\rangle = \lambda_k|x_k\rangle$$

$$\langle y_k|W = \langle y_k|\lambda_k$$

$$\langle y_i|x_j\rangle = \delta_{i,j}$$

De acordo com o teorema espectral para operadores autoadjuntos em espaços de Hilbert, W pode ser reconstruído em termos de $|x_k\rangle$ e $\langle y_k|$ da seguinte forma:

$$W = \sum_{k=0}^{d^2-1} \lambda_k |x_k\rangle \langle y_k|, \lambda_k \in \mathbb{R}$$

A solução formal para $|\rho(t)\rangle$ pode, então, ser escrita como:

$$|\rho(t)\rangle = \sum_{k=0}^{d^2-1} e^{\lambda_k t} |x_k\rangle \langle y_k|\rho(0)\rangle$$

O estado estacionário $|\rho^*\rangle$ é aquele que satisfaz a $d|\rho^*\rangle/dt = 0$, isto é, é aquele dado pelo autovetor de W com autovalor zero (diga-se, para $k = 0$). Explicitando-se $|\rho^*\rangle$ na solução acima:

$$|\rho(t)\rangle = |\rho^*\rangle + \sum_{k=1}^{d^2-1} e^{\lambda_k t} |x_k\rangle \langle y_k | \rho(0)\rangle$$

Para a equação de Lindblad particular considerada aqui, resultados gerais [29, 30] garantem que os demais autovalores de W são negativos, de modo que o sistema atinge, de fato, o estado estacionário para $t \rightarrow \infty$.

O vetor $|\rho^*\rangle$ gera o espaço nulo de W . Esse espaço pode ser calculado utilizando-se eliminação de Gauss, método que envolve apenas operações aritméticas básicas. Desse modo, $|\rho^*\rangle$ terá sempre a forma de uma razão de polinômios em todos os parâmetros, e ρ^* pode, em princípio, ao menos, ser sempre computado exatamente. Ademais, para N finito, ρ^* será sempre analítico em todos os parâmetros. Esse método, numericamente exato, pode ser utilizado para cálculos computacionais e é implementado aqui.

Por meio do *software* Mathematica[®], obtiveram-se a matriz densidade do sistema no estado estacionário e resultados exatos para os fluxos de energia e magnetização para o caso $N = 3$. Por simplicidade, tomou-se $\gamma = 1$. Apresentam-se os resultados abaixo:

$$\begin{aligned} \langle J^M \rangle = & (16f\alpha^2(9 + 768\alpha^4 + (48 - 32f^2)\Delta^2 + 64\alpha^2(3 + 4\Delta^2)))/(9 \\ & + 12288\alpha^6 + 32(3 + 2f^2)\Delta^2 + 256\Delta^4 + 256\alpha^4(15 \\ & + 16\Delta^2) + 4\alpha^2(84 - 64(-7 + 2f^2)\Delta^2)) \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\langle J^E \rangle = B \langle J^M \rangle \quad (2.31)$$

O resultado (2.31) é exatamente o esperado – ver expressão (2.28).

Por ser altamente simétrico, o sistema não apresenta retificação quanto a nenhum dos fluxos. Como se pode ver na expressão (2.30), ao se inverter o sinal de f – isto é, ao se inverterem os reservatórios –, o fluxo de magnetização apenas troca de sinal. O mesmo acontece com o fluxo de energia, $\langle J^E \rangle$, que diretamente proporcional a $\langle J^M \rangle$. O objetivo maior desta seção foi o desenvolvimento dos cálculos teóricos. A partir da próxima seção, tomando-se esta como base, introduzem-se assimetrias no sistema e estuda-se como os fluxos se comportam.

2.2 Δ graded

Estuda-se agora o sistema com parâmetro Δ *graded*. O Hamiltoniano é dado por:

$$H = B \sum_{i=1}^N \sigma_i^z + \sum_{i=1}^{N-1} [\alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z] \quad (2.32)$$

A dinâmica do sistema é modelada pela equação de Lindblad (2.2). Assumem-se, mais uma vez, parâmetros simétricos da forma $f_L = -f_R \equiv f$.

Segue-se o mesmo roteiro da seção anterior. Os cálculos são inteiramente análogos, de tal forma que apenas se apontarão as diferenças, quando existentes, e mostrar-se-ão os resultados. O foco desta seção é discutir como tornar o parâmetro Δ *graded* interfere no comportamento dos fluxos de energia e magnetização.

2.2.1 Fluxo de magnetização

O parâmetro Δ não entra nos cálculos do fluxo de magnetização, e os resultados são idênticos aos da seção anterior, sendo repetidos a seguir:

$$\langle J_i^M \rangle = 2\alpha \langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x \rangle, 1 \leq i \leq N \quad (2.8)$$

$$\langle J_L^M \rangle = \gamma(f - \langle \sigma_1^z \rangle) \quad (2.9)$$

$$\langle J_R^M \rangle = -\gamma(f + \langle \sigma_N^z \rangle) \quad (2.10)$$

No estado estacionário, o fluxo torna-se homogêneo através da cadeia:

$$\langle J_L^M \rangle_{NESS} = \langle J_1^M \rangle_{NESS} = \langle J_2^M \rangle_{NESS} = \dots = \langle J_N^M \rangle_{NESS} = \langle J_R^M \rangle_{NESS} \equiv \langle J^M \rangle$$

2.2.2 Fluxo de energia

Reescreve-se o Hamiltoniano (2.32) da seguinte forma:

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} \varepsilon_{i,i+1} = \sum_{i=1}^{N-1} (h_{i,i+1} + b_{i,i+1}),$$

$$h_{i,i+1} \equiv \alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z,$$

$$b_{i,i+1} \equiv \frac{1}{2} B [\sigma_i^z (1 + \delta_{i,1}) + \sigma_{i+1}^z (1 + \delta_{i+1,N})]$$

Tomar Δ *graded* modifica apenas as equações quanto à componente XXZ do fluxo de energia. Mostram-se os resultados a seguir, juntamente àqueles para a componente B, os quais são repetidos:

$$\langle J_1^{XXZ} \rangle = -\frac{\gamma}{2} (\langle h_{1,2} \rangle + \Delta_{1,2} \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle) + \gamma f \Delta_{1,2} \langle \sigma_2^z \rangle \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} \langle J_i^{XXZ} \rangle = & 2\alpha \langle \alpha (\sigma_{i-1}^y \sigma_i^z \sigma_{i+1}^x - \sigma_{i-1}^x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^y) \\ & + \Delta_{i-1,i} (\sigma_{i-1}^z \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_{i-1}^z \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x) \\ & + \Delta_{i,i+1} (\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y \sigma_{i+1}^z - \sigma_{i-1}^y \sigma_i^x \sigma_{i+1}^z) \rangle, 1 < i < N \end{aligned} \quad (2.34)$$

$$\langle J_N^{XXZ} \rangle = \frac{\gamma}{2} (\langle h_{N-1,N} \rangle + \Delta_{N-1,N} \langle \sigma_{N-1}^z \sigma_N^z \rangle) - \gamma f \Delta_{N-1,N} \langle \sigma_{N-1}^z \rangle \quad (2.35)$$

$$\langle J_1^B \rangle = \gamma B (f - \langle \sigma_1^z \rangle) \quad (2.21)$$

$$\langle J_i^B \rangle = \frac{1}{2} B \langle J_{i-1}^M + J_i^M \rangle, 1 < i < N \quad (2.19)$$

$$\langle J_N^B \rangle = -\gamma B (f + \langle \sigma_N^z \rangle) \quad (2.23)$$

No estado estacionário:

$$\langle J_1^E \rangle_{NESS} = \langle J_2^E \rangle_{NESS} = \dots = \langle J_N^E \rangle_{NESS} \equiv \langle J^E \rangle = \langle J^{XXZ} \rangle + B \langle J^M \rangle,$$

sendo

$$\langle J_1^{XXZ} \rangle_{NESS} = \dots = \langle J_N^{XXZ} \rangle_{NESS} \equiv \langle J^{XXZ} \rangle$$

2.2.3 Análise de simetria

Ao se introduzir Δ *graded*, a simetria apresentada na seção anterior, a qual implicava em $\langle J^{XXZ} \rangle = 0$, é quebrada – é evidente que o operador de reflexão R modifica completamente o Hamiltoniano nesse caso, e que a equação de Lindblad perde, pois, sua

invariância sob a transformação $U = \Omega^\beta R$. Essa componente não é mais compelida a zero, e a análise de simetria não mais fornece informações a seu respeito. Entretanto, no regime normal ($\Delta_{i,i+1} > 1 \forall i$) [24], ao menos, o sistema apresenta condições suficientes para haver retificação [26]: o fluxo de energia é proporcional ao gradiente de energia, e a constante de proporcionalidade tem uma estrutura *graded* – essa constante depende de diversos fatores, dentre eles, a interação entre os spins. Uma vez existente uma estrutura *graded* na interação de troca, na direção z , tal constante herda essa estrutura. Assim sendo, o fluxo de energia deve apresentar retificação – e, com efeito, apresenta, conforme a próxima seção.

Ver-se-á que, para $B = 0$, os fluxos de energia para o sistema original e para aquele com os reservatórios invertidos (fazendo-se $f \rightarrow -f$) são iguais, tanto em módulo quanto em sentido. Nesse regime, o fluxo de energia é especificado completamente por sua componente XXZ , já que a componente B é nula. Dessa forma, a componente XXZ é uma função par de f , e isso não só para $B = 0$ – a introdução de um campo magnético uniforme não afeta a componente XXZ (ver 2.1.3). De acordo com a seção anterior, no estado estacionário, tem-se:

$$\langle J^E \rangle = \langle J^{XXZ} \rangle + B \langle J^M \rangle$$

A assimetria na cadeia inserida por meio de Δ *graded* não afeta o fluxo de magnetização quanto à presença de retificação, a qual permanece inexistente para esse fluxo. Logo, $\langle J^M \rangle$ é uma função ímpar de f . Sendo $\langle J^E \rangle$ formado pela soma de uma função par e uma função ímpar quanto a f , fica clara a existência de retificação para esse fluxo.

2.2.4 Soluções exatas para $N = 3$

Considera-se o Hamiltoniano da seguinte forma:

$$H = B \sum_{i=1}^3 \sigma_i^z + \sum_{i=1}^2 [\alpha (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z],$$

$$\Delta_{1,2} = \Delta - \delta$$

$$\Delta_{2,3} = \Delta + \delta$$

Por meio do *software* Mathematica[®], obtiveram-se a matriz densidade do sistema no estado estacionário e resultados exatos para os fluxos de energia e magnetização. Por simplicidade, tomou-se $\gamma = 1$. Apresentam-se os resultados a seguir:

$$\begin{aligned}
\langle J^M \rangle = & ((16f\alpha^2(589824\alpha^8 \\
& + 32768\alpha^6(9 + 8(9 + 5f^2)\delta^2 \\
& + 6\Delta^2)(1 + 16\delta^2)^2(256(3 - 2f^2)^2 \delta^4(9 \\
& + (48 - 32f^2)\Delta^2)^2 - 32(-3 + 2f^2)\delta^2(9 \\
& + 16(-3 + 2f^2)\Delta^2)) + 512\alpha^4(99 \\
& + 256(15 - 6f^2 + 2f^4)\delta^4 - 48(-5 + 2f^2)\Delta^2 \\
& - 32\delta^2(-48(1 + 2\Delta^2) + f^2(-7 + 24\Delta^2))) - 64\alpha^2(1 \\
& + 16\delta^2)(256(-3 - f^2 + 2f^4)\delta^4 + (6 + 4\Delta^2)(-9 \\
& + 16(-3 + 2f^2)\Delta^2) - 16\delta^2(27 + 156\Delta^2 + 32f^4 \Delta^2 \\
& - f^2(3 + 152\Delta^2)))))) / (9437184\alpha^{10} \\
& + 65536\alpha^8(81 + 16(39 + 20f^2)\delta^2 + 48\Delta^2) \\
& + 8192\alpha^6(135 + 256(21 - 3f^2 + 2f^4)\delta^4 \\
& - 48(-7 + 2f^2)\Delta^2 \\
& + 16\delta^2(126 + 272\Delta^2 + f^2(21 - 48\Delta^2))) (1 \\
& + 16\delta^2)^2(-81 + 4096(-3 + 2f^2)\delta^6 - 144(9 + 2f^2)\Delta^2 \\
& + 256(-27 + 8f^4)\Delta^4 + 4096(-3 + 2f^2)\Delta^6 \\
& + 256\delta^4(-27 + 8f^4 + 48\Delta^2 - 32f^2\Delta^2) - 16\delta^2(81 \\
& + 288\Delta^2 + 256f^4 \Delta^2 - 768\Delta^4 + 2f^2(9 + 256\Delta^4))) \\
& - 512\alpha^4(-207 + 4096(-11 + f^2 + 4f^4)\delta^6 \\
& + 48(-26 + 7f^2)\Delta^2 + 256(-3 + f^2)\Delta^4 - 256\delta^4(107 \\
& + 448\Delta^2 + 8f^4(-1 + 8\Delta^2) - 8f^2(2 + 36\Delta^2)) \\
& - 16\delta^2(291 + 1664\Delta^2 + 64f^4\Delta^2 + 768\Delta^4 - f^2(7 \\
& + 592\Delta^2 + 256\Delta^4))) + 16\alpha^2(1 + 16\delta^2)(297 \\
& + 4096(13 - 10f^2 + 4f^4)\delta^6 - 96(-33 + 2f^2)\Delta^2 \\
& + 256(33 - 20f^2 + 4f^4)\Delta^4 - 256\delta^4(-111 + 32\Delta^2 \\
& + f^2(44 - 448\Delta^2) + 4f^4(-5 + 32\Delta^2)) + 16\delta^2(315 \\
& + 2112\Delta^2 + 6400\Delta^4 + 128f^4\Delta^2(-3 + 8\Delta^2) - 2f^2(33 \\
& + 64\Delta^2 + 2304\Delta^4))))))
\end{aligned} \tag{2.36}$$

$$\begin{aligned}
\langle J^E \rangle = & (16f\alpha^2(2f\delta(196608\alpha^6\Delta^2 - 256\alpha^4(9 + 256\delta^4 - 192f^2\Delta^2 - 256\Delta^4 \\
& - 32\delta^2(-5 + 16(-3 + f^2)\Delta^2)) - 32\alpha^2(1 + 16\delta^2)(256(2 \\
& + f^2)\delta^4 + 16\delta^2(21 + 9f^2 + 104\Delta^2) - (9 + 16\Delta^2)(-3 + 8(-1 \\
& + 2f^2)\Delta^2)) + (1 + 16\delta^2)^2(-81 + 256(-3 + 2f^2)\delta^4 - 768\Delta^4 \\
& + 32f^2\Delta^2(-9 + 16\Delta^2) - 32\delta^2(18 - 48\Delta^2 + f^2(-9 + 32\Delta^2)))) \\
& + \mathbf{B}(589824\alpha^8 + 32768\alpha^6(9 + 8(9 + 5f^2)\delta^2 + 6\Delta^2) \\
& + (1 + 16\delta^2)^2(256(3 - 2f^2)^2\delta^4 + (9 + (48 - 32f^2)\Delta^2)^2 \\
& - 32(-3 + 2f^2)\delta^2(9 + 16(-3 + 2f^2)\Delta^2)) + 512\alpha^4(99 \\
& + 256(15 - 6f^2 + 2f^4)\delta^4 - 48(-5 + 2f^2)\Delta^2 - 32\delta^2(-48(1 \\
& + 2\Delta^2) + f^2(-7 + 24\Delta^2))) - 64\alpha^2(1 + 16\delta^2)(256(-3 - f^2 \\
& + 2f^4)\delta^4 + (6 + 4\Delta^2)(-9 + 16(-3 + 2f^2)\Delta^2) - 16\delta^2(27 \\
& + 156\Delta^2 + 32f^4\Delta^2 - f^2(3 + 152\Delta^2)))))))/(9437184\alpha^{10} \\
& + 65536\alpha^8(81 + 16(39 + 20f^2)\delta^2 + 48\Delta^2) + 8192\alpha^6(135 \\
& + 256(21 - 3f^2 + 2f^4)\delta^4 - 48(-7 + 2f^2)\Delta^2 + 16\delta^2(126 \\
& + 272\Delta^2 + f^2(21 - 48\Delta^2))) - (1 + 16\delta^2)^2(-81 + 4096(-3 \\
& + 2f^2)\delta^6 - 144(9 + 2f^2)\Delta^2 + 256(-27 + 8f^4)\Delta^4 + 4096(-3 \\
& + 2f^2)\Delta^6 + 256\delta^4(-27 + 8f^4 + 48\Delta^2 - 32f^2\Delta^2) - 16\delta^2(81 \\
& + 288\Delta^2 + 256f^4\Delta^2 - 768\Delta^4 + 2f^2(9 + 256\Delta^4))) \\
& - 512\alpha^4(-207 + 4096(-11 + f^2 + 4f^4)\delta^6 + 48(-26 + 7f^2)\Delta^2 \\
& + 256(-3 + f^2)\Delta^4 - 256\delta^4(107 + 448\Delta^2 + 8f^4(-1 + 8\Delta^2) \\
& - 8f^2(2 + 36\Delta^2)) - 16\delta^2(291 + 1664\Delta^2 + 64f^4\Delta^2 + 768\Delta^4 \\
& - f^2(7 + 592\Delta^2 + 256\Delta^4))) + 16\alpha^2(1 + 16\delta^2)(297 + 4096(13 \\
& - 10f^2 + 4f^4)\delta^6 - 96(-33 + 2f^2)\Delta^2 + 256(33 - 20f^2 \\
& + 4f^4)\Delta^4 - 256\delta^4(-111 + 32\Delta^2 + f^2(44 - 448\Delta^2) + 4f^4(-5 \\
& + 32\Delta^2)) + 16\delta^2(315 + 2112\Delta^2 + 6400\Delta^4 + 128f^4\Delta^2(-3 \\
& + 8\Delta^2) - 2f^2(33 + 64\Delta^2 + 2304\Delta^4))))))
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Nota-se aqui a relação previamente anunciada: $\langle J^E \rangle = \langle J^{XXZ} \rangle + B\langle J^M \rangle$.

Ainda por meio do *software Mathematica*[®], construíram-se gráficos para os fluxos de energia e magnetização em função de Δ . Mostram-se as curvas para os fluxos no sistema com a configuração original (em azul) e com os reservatórios invertidos (fazendo-se $f \rightarrow -f$) (em laranja).

O GRAF. 1 mostra um caso típico para o fluxo de magnetização. Esse fluxo não apresenta retificação, e, como esperado, as curvas para as duas configurações consideradas são simétricas em relação ao eixo horizontal.

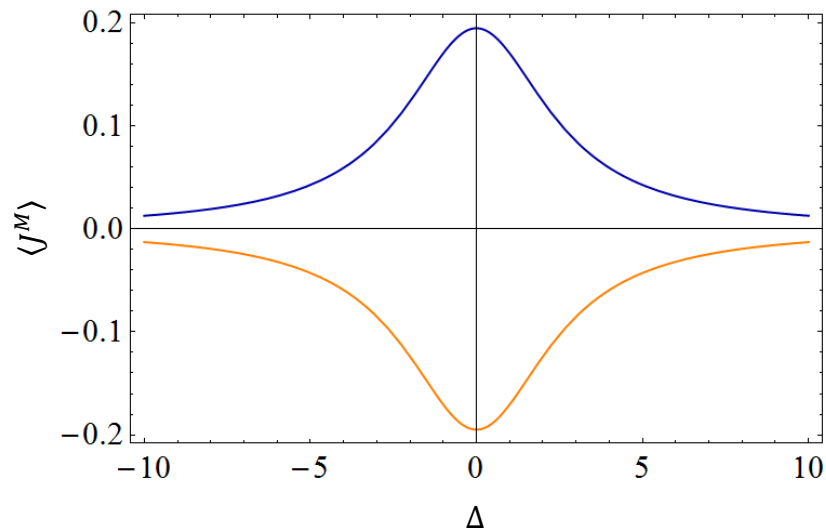


GRÁFICO 1 - Fluxo de magnetização em função de Δ para $f = \frac{1}{2}$, $\alpha = 1$ e $\delta = 2$ (em azul). A curva em laranja segue fazendo-se $f \rightarrow -f$.

O GRAF. 2 mostra o fluxo de energia para o caso $\delta = 0$. Nesse caso, a simetria da cadeia é reestabelecida, e volta-se à situação de Δ não *graded*, de forma que o fluxo de energia não apresenta retificação – e as curvas para as configurações original e invertida são também simétricas em relação ao eixo horizontal.

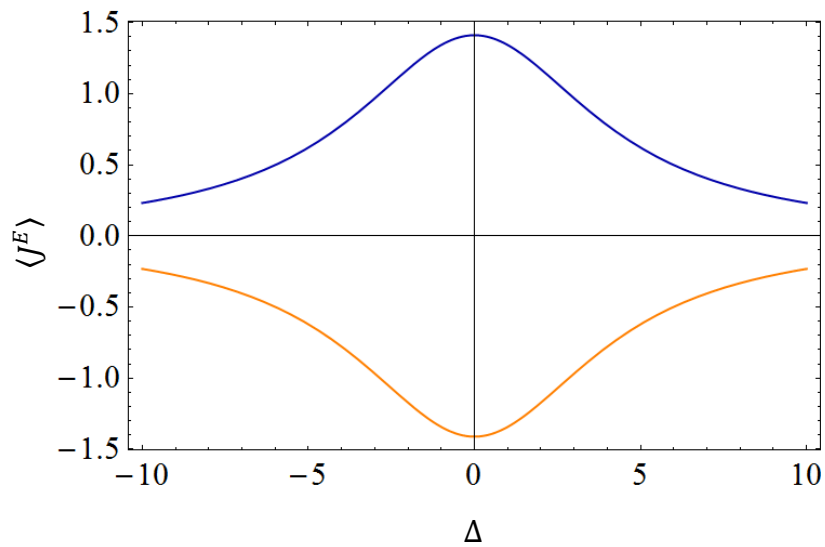


GRÁFICO 2 - Fluxo de energia em função de Δ para $f = \frac{1}{2}$, $B = 3$, $\alpha = 1$ e $\delta = 0$ (em azul). A curva em laranja segue fazendo-se $f \rightarrow -f$.

O GRAF. 3 (a) mostra um caso típico para o fluxo de energia. Para $B > 0$, se $\delta > 0$, para cada Δ , o fluxo no sistema com os reservatórios invertidos (em laranja) é maior, em módulo, que o fluxo no sistema com a configuração original (em azul). O primeiro se dá num sentido tal que $\Delta_{i,i+1}$ é decrescente, e o último, num sentido tal que $\Delta_{i,i+1}$ é crescente. Os GRAF. 3 (b), (c) e (d) mostram a mesma situação para, respectivamente, $B > 0$, $\delta < 0$; $B < 0$, $\delta > 0$ e $B < 0$, $\delta < 0$.

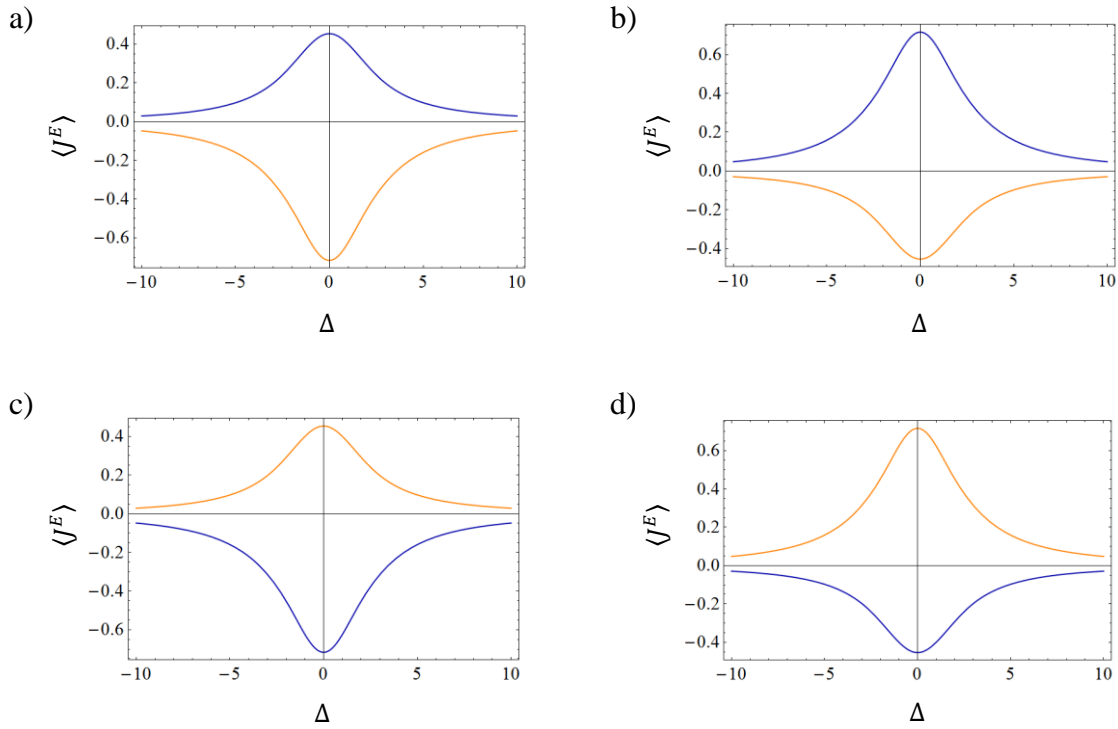


GRÁFICO 3 - Fluxo de energia em função de Δ (em azul – as curvas em laranja seguem para $f \rightarrow -f$):

- a) $B > 0$, $\delta > 0$ ($f = \frac{1}{2}$, $B = 3$, $\alpha = 1$ e $\delta = 2$)
- b) $B > 0$, $\delta < 0$ ($f = \frac{1}{2}$, $B = 3$, $\alpha = 1$ e $\delta = -2$)
- c) $B < 0$, $\delta > 0$ ($f = \frac{1}{2}$, $B = -3$, $\alpha = 1$ e $\delta = 2$)
- d) $B < 0$, $\delta < 0$ ($f = \frac{1}{2}$, $B = -3$, $\alpha = 1$ e $\delta = -2$)

A partir dos GRAF. 3 (a) a (d), constatam-se as simetrias gerais – isto é, para todos os parâmetros não nulos – presentes no sistema quanto ao fluxo de energia. As curvas para δ invertido podem ser obtidas a partir das originais por meio de uma reflexão em relação ao eixo horizontal e invertendo-se as suas cores (quer dizer, fazendo-se $f \rightarrow -f$) – ou seja: $\langle J^E \rangle(\delta, f) = -\langle J^E \rangle(-\delta, -f)$. As curvas para B invertido, por suas vezes, podem ser obtidas a partir das originais apenas se invertendo as suas cores – ou seja: $\langle J^E \rangle(B, f) = \langle J^E \rangle(-B, -f)$. A comparação do gráfico (a) ao (d) e do (b) ao (c) revela a combinação dessas duas simetrias e mostra que $\langle J^E \rangle(\delta, B) = -\langle J^E \rangle(-\delta, -B)$.

O GRAF. 4 mostra um caso peculiar para o fluxo de energia, quando $B = 0$. Nesse caso, os fluxos são iguais, e suas curvas aparecem sobrepostas no gráfico. Fazer $B = 0$ introduz uma degenerescência no sistema. Quando o campo magnético é nulo, a componente B do fluxo de energia é, também, nula. Logo, esse fluxo é completamente especificado pela componente

XXZ. Essa componente depende dos parâmetros $\Delta_{i,i+1}$, os quais determinam, em parte, o sentido do fluxo (ver cap. 3) – o fluxo pode correr no sentido de crescimento ou decréscimo de J^z , e ao se inverter a cadeia, inverte-se também o seu sentido. Não é difícil entender por que inverter os reservatórios, nesse caso, não afeta o fluxo de energia. Os reservatórios injetam, em diferentes proporções, spins “para cima” e “para baixo” no sistema. Na ausência de campo magnético, não há diferença energética entre um spin “para cima” e um spin “para baixo”, e, portanto, suas contribuições para o fluxo são idênticas. Nem o sentido, nem o módulo do fluxo são afetados por essa inversão.

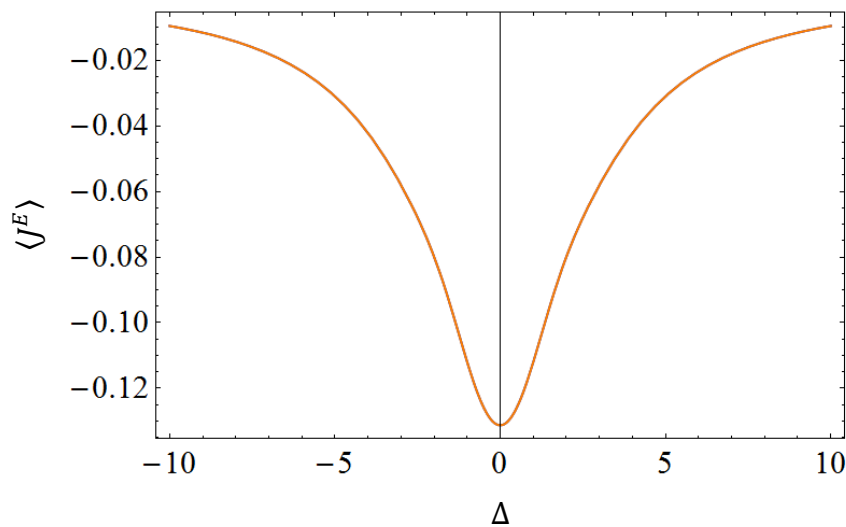


GRÁFICO 4 - Fluxo de energia em função de Δ para $f = \pm \frac{1}{2}$, $B = 0$, $\alpha = 1$ e $\delta = 2$.

Com o intuito de se obter uma medida para a retificação quanto ao fluxo de energia, constrói-se o coeficiente de retificação de energia. Chamando-se de $\langle J^E \rangle_I$ o fluxo de energia para o sistema com os reservatórios invertidos, esse coeficiente é definido como:

$$R_E \equiv 100\% \times \frac{|\langle J^E \rangle| - |\langle J^E \rangle_I|}{\min\{|\langle J^E \rangle|, |\langle J^E \rangle_I|\}}$$

em que $\min\{a, b\} = \begin{cases} a, & a < b; \\ b, & a > b. \end{cases}$; $a, b \in \mathbb{R}$.

Como foi definido, esse coeficiente não se aplica a regiões patológicas – de fluxos $\langle J^E \rangle$ e $\langle J^E \rangle_I$ ambos nulos, por exemplo.

O GRAF. 5 mostra R_E em função de Δ para um caso típico de retificação.

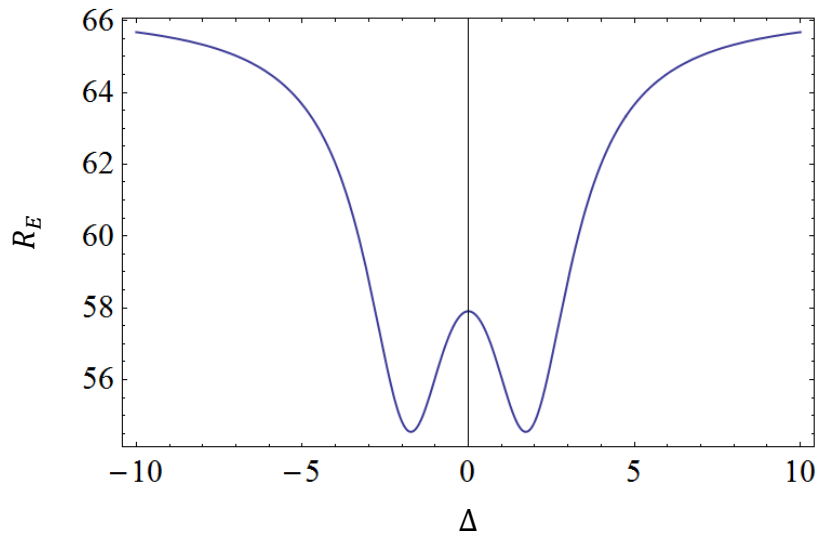


GRÁFICO 5 - Coeficiente de retificação de energia em função de Δ para $f = \frac{1}{2}$,
 $B = 3$, $\alpha = 1$ e $\delta = 2$.

Esse coeficiente, como foi definido, não se aplica ao caso de retificação atípica exibida pelo sistema quando $B = 0$. O coeficiente R_E seria nulo nesse caso especial, que deve ser tratado à parte.

2.3 Nota sobre unidades

Elucidam-se, nesta seção, alguns pontos relativos às unidades das grandezas e constantes que se fazem presentes nesta dissertação. Devido a mudanças de escala comuns em estudos teóricos – como tomar $\hbar = 1$ –, podem-se encontrar discrepâncias nas unidades das variáveis dinâmicas estudadas, já que essas mudanças de escala combinam-se e propagam-se no decorrer dos cálculos. Em trabalhos similares, é infrequente a preocupação com a questão das unidades, e, a fim de sanar dubiedades iminentes, prestam-se aqui alguns esclarecimentos.

A começar pelo Hamiltoniano, conforme mencionado na Introdução, o primeiro termo é devido ao acoplamento do momento de dipolo magnético intrínseco dos spins ao campo magnético externo (na direção z). A contribuição devida a essa interação é dada por:

$$-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

Para uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ sem estrutura interna, o momento de dipolo magnético $\vec{\mu}$ é dado por:

$$\boldsymbol{\mu} = \Gamma \mathbf{S} = \frac{g_S q \hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma},$$

em que $g_S \approx 2$ é o fator g de spin, q é a carga da partícula, e m é a sua massa. Γ é denominado fator giromagnético. No SI², $[\Gamma] = s^{-1} \cdot T^{-1}$ e $[\hbar] = J \cdot s$.

No Hamiltoniano utilizado, fizeram-se $\hbar = 1$ e $\Gamma = 2$. Evidenciando-se as unidades das constantes suprimidas, o primeiro termo é escrito como:

$$(J \cdot T^{-1}) B \sum_{i=1}^N \sigma_i^z$$

Os operadores de spin de Pauli são adimensionais. No segundo termo, devido à interação de troca, então, deve-se ter $[\alpha] = [\Delta] = J$. O Hamiltoniano tem unidade de energia.

Na equação de Lindblad (2.2), tomou-se, também, $\hbar = 1$. Essa constante aparece, originalmente, dividindo os termos do lado direito da equação. Sendo o operador de estado adimensional, os termos dessa equação têm unidade de s^{-1} . Além disso, $[\gamma] = [H] = J$.

As alterações de escala no Hamiltoniano e na equação de Lindblad afetam os fluxos de magnetização e energia. Um olhar ingênuo sobre as expressões (2.8) a (2.10), por exemplo, levaria a concluir que o fluxo de magnetização tem unidade de energia, em total contradição com a sua definição primária. Incluindo-se as unidades das constantes omitidas nos resultados obtidos para os fluxos, obtêm-se $[\langle J^M \rangle] = s^{-1}$ e $[\langle J^E \rangle] = J \cdot s^{-1}$, em consonância com as suas respectivas definições.

² Sistema Internacional de Unidades.

3 ANÁLISE DOS FLUXOS NA CADEIA SUBMETIDA A UM CAMPO MAGNÉTICO *GRADED*

Neste capítulo, estudam-se os fluxos de energia e magnetização, no estado estacionário, na cadeia de spin sujeita a um campo magnético externo *graded*. Analisam-se, mais uma vez, os casos de estrutura *graded* e não *graded* do parâmetro de anisotropia Δ . Apresentam-se resultados teóricos para os fluxos e também soluções exatas, obtidas por meio do *software* Mathematica[®], para o caso $N = 3$. Com o propósito de mostrar que a retificação quanto ao fluxo de energia não é um fenômeno limitado ao modelo estudado, investigam-se também – por meio de análise computacional com o *software* Mathematica[®] – configurações distintas da cadeia de spin quanto ao tamanho da cadeia, às interações internas e às condições de contorno.

3.1 Δ não *graded*

Investiga-se a cadeia de spin sujeita a um campo magnético externo *graded* B . O Hamiltoniano é dado por:

$$H = \sum_{i=1}^N B_i \sigma_i^z + \sum_{i=1}^{N-1} [\alpha (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z] \quad (3.1)$$

A dinâmica do sistema é modelada pela equação de Lindblad (2.2).

3.1.1 Fluxo de magnetização

O campo magnético externo não interfere no cálculo do fluxo de magnetização, uma vez que a parte do Hamiltoniano devida ao campo magnético comuta com σ_i^z , $1 \leq i \leq N$. Os resultados são os mesmos obtidos no capítulo anterior e são repetidos a seguir:

$$\langle J_i^M \rangle = 2\alpha \langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x \rangle, 1 \leq i \leq N \quad (2.8)$$

$$\langle J_L^M \rangle = \gamma(f - \langle \sigma_1^z \rangle) \quad (2.9)$$

$$\langle J_R^M \rangle = -\gamma(f + \langle \sigma_N^z \rangle) \quad (2.10)$$

No estado estacionário, o fluxo torna-se homogêneo através da cadeia:

$$\langle J_L^M \rangle_{NESS} = \langle J_1^M \rangle_{NESS} = \langle J_2^M \rangle_{NESS} = \dots = \langle J_N^M \rangle_{NESS} = \langle J_R^M \rangle_{NESS} \equiv \langle J^M \rangle$$

3.1.2 Fluxo de energia

Reescreve-se o Hamiltoniano (3.1) da seguinte forma:

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} \varepsilon_{i,i+1} = \sum_{i=1}^{N-1} (h_{i,i+1} + b_{i,i+1}),$$

$$h_{i,i+1} \equiv \alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z,$$

$$b_{i,i+1} \equiv \frac{1}{2} [B_i \sigma_i^z (1 + \delta_{i,1}) + B_{i+1} \sigma_{i+1}^z (1 + \delta_{i+1,N})]$$

A introdução de um campo magnético *graded* modifica apenas as equações (da seção 2.1) quanto à componente B do fluxo de energia. Os resultados para essa componente são similares aos do capítulo anterior e são mostrados a seguir, juntamente àqueles para a componente XXZ, os quais são repetidos:

$$\langle J_1^{XXZ} \rangle = -\frac{\gamma}{2} (\langle h_{1,2} \rangle + \Delta \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle) + \gamma f \Delta \langle \sigma_2^z \rangle \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} \langle J_i^{XXZ} \rangle = & 2\alpha \langle \alpha(\sigma_{i-1}^y \sigma_i^z \sigma_{i+1}^x - \sigma_{i-1}^x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^y) + \Delta(\sigma_{i-1}^z \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y \\ & - \sigma_{i-1}^y \sigma_i^x \sigma_{i+1}^z) + \Delta(\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y \sigma_{i+1}^z \\ & - \sigma_{i-1}^z \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x) \rangle, 1 < i < N \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\langle J_N^{XXZ} \rangle = \frac{\gamma}{2} (\langle h_{N-1,N} \rangle + \Delta \langle \sigma_{N-1}^z \sigma_N^z \rangle) - \gamma f \Delta \langle \sigma_{N-1}^z \rangle \quad (2.22)$$

$$\langle J_1^B \rangle = \gamma B_1 (f - \langle \sigma_1^z \rangle) \quad (3.2)$$

$$\langle J_i^B \rangle = \frac{1}{2} B_i (\langle J_{i-1}^M \rangle + \langle J_i^M \rangle), 1 < i < N \quad (3.3)$$

$$\langle J_N^B \rangle = -\gamma B_N (f + \langle \sigma_N^z \rangle) \quad (3.4)$$

No estado estacionário:

$$\langle J_1^E \rangle_{NESS} = \langle J_2^E \rangle_{NESS} = \dots = \langle J_N^E \rangle_{NESS} \equiv \langle J^E \rangle$$

3.1.3 Soluções exatas para $N = 3$

Considera-se o Hamiltoniano da seguinte forma:

$$H = \sum_{i=1}^3 B_i \sigma_i^z + \sum_{i=1}^2 [\alpha (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z],$$

$$B_1 = b - \zeta$$

$$B_2 = b$$

$$B_3 = b + \zeta$$

Por meio do *software* Mathematica[®], obtiveram-se a matriz densidade do sistema no estado estacionário e resultados exatos para os fluxos de energia e magnetização para o caso $N = 3$. Como no capítulo anterior, por simplicidade, tomou-se $\gamma = 1$. Apresentam-se os resultados abaixo:

$$\begin{aligned} \langle J^M \rangle = & 16f\alpha^2(768\alpha^4 - (-9 + 16(-3 + 2f^2)\Delta^2 - 32f\Delta\zeta - 16\zeta^2)(1 \\ & + 16\zeta^2) + 64\alpha^2(3 + 4\Delta^2 + 8f\Delta\zeta + 16\zeta^2))/(12288\alpha^6 \\ & - 16\alpha^2(-21 + 16(-7 + 2f^2)\Delta^2 + 32f\Delta\zeta - 80\zeta^2)(1 \\ & + 16\zeta^2) + 256\alpha^4(15 + 16\Delta^2 + 32f\Delta\zeta + 112\zeta^2) + (1 \\ & + 16\zeta^2)(9 + 256\Delta^4 - 256f\Delta\zeta + 160\zeta^2 + 256\zeta^4 \\ & + 32\Delta^2(3 + 2f^2 - 16\zeta^2))) \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\langle J^E \rangle = b \langle J^M \rangle \quad (3.6)$$

Nota-se a semelhança entre os resultados (2.31) e (3.6) – b é a parte uniforme do campo magnético.

A não homogeneidade do campo magnético é suficiente para fazer com que haja retificação quanto aos fluxos de magnetização e energia. Como se pode notar, na expressão (3.5), aparecem termos de potência ímpar em f . Ao se inverter o sinal de f , apenas esses termos

trocam de sinal, e o valor do fluxo muda. De fato, para a vigente escolha dos operadores de Lindblad, o sistema sempre apresenta retificação quanto ao fluxo de magnetização para uma cadeia com $N > 2$ sítios [13]. A retificação quanto ao fluxo de energia decorre daquela quanto ao fluxo de magnetização devido à forma de (3.6). Na próxima seção, estudam-se os efeitos da sobreposição das assimetrias estabelecidas pelo campo magnético e por Δ – ambos *graded* – sobre a retificação desses fluxos.

Ainda por meio do *software* Mathematica[®], construíram-se gráficos para os fluxos de energia e magnetização em função de Δ . Mostram-se as curvas para os fluxos no sistema com a configuração original (em azul) e com os reservatórios invertidos (fazendo-se $f \rightarrow -f$) (em roxo).

Os GRAF. 6 e 7 mostram casos típicos dos fluxos de magnetização e de energia, respectivamente.

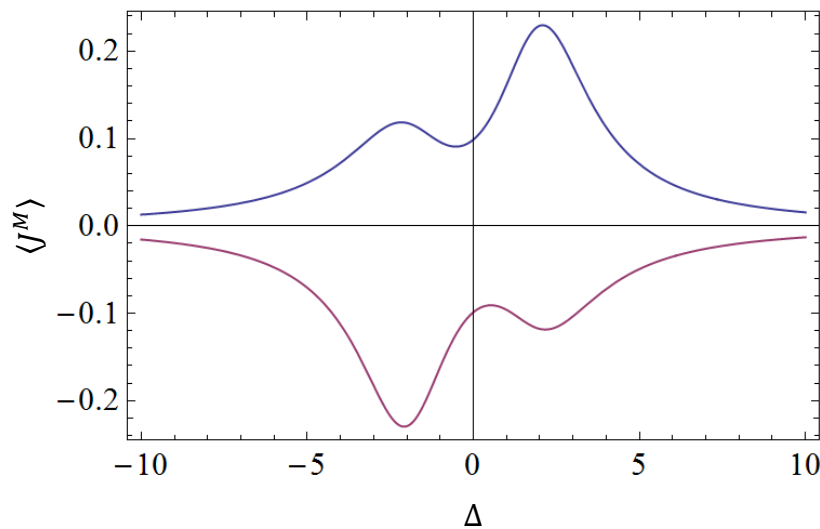


GRÁFICO 6 - Fluxo de magnetização em função de Δ para $f = \frac{1}{2}$, $\zeta = 2$ e $\alpha = 1$ (em azul). A curva em roxo segue fazendo-se $f \rightarrow -f$.

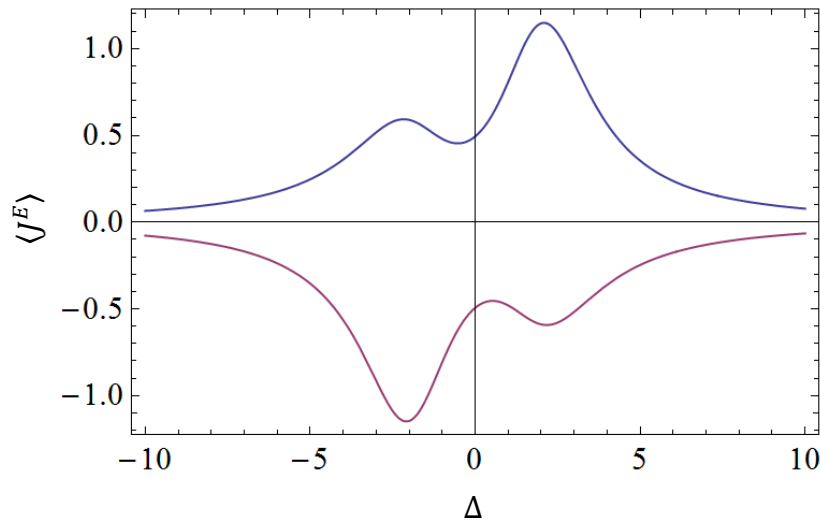


GRÁFICO 7 - Fluxo de energia em função de Δ para $f = \frac{1}{2}$, $b = 5$, $\zeta = 2$ e $\alpha = 1$ (em azul). A curva em roxo segue fazendo-se $f \rightarrow -f$.

Os fluxos para o sistema com os reservatórios invertidos (em roxo) podem ser obtidos a partir daqueles para o sistema original (em azul) por meio de uma reflexão em relação ao eixo horizontal seguida de uma em relação ao eixo vertical – ou seja: $\langle J^M \rangle(\Delta, f) = -\langle J^M \rangle(-\Delta, -f)$, e $\langle J^E \rangle(\Delta, f) = -\langle J^E \rangle(-\Delta, -f)$. As curvas para $\langle J^M \rangle$ e $\langle J^E \rangle$ têm a mesma forma devido à expressão (3.6).

3.2 Δ graded

Estuda-se agora o sistema, sob a mesma dinâmica, com parâmetro Δ *graded*. O Hamiltoniano é dado por:

$$H = \sum_{i=1}^N B_i \sigma_i^z + \sum_{i=1}^{N-1} [\alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z] \quad (3.7)$$

3.2.1 Fluxo de magnetização

Os resultados são, mais uma vez, idênticos aos da seção anterior e são mostrados abaixo:

$$\langle J_i^M \rangle = 2\alpha \langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x \rangle, 1 \leq i \leq N \quad (2.8)$$

$$\langle J_L^M \rangle = \gamma(f - \langle \sigma_1^z \rangle) \quad (2.9)$$

$$\langle J_R^M \rangle = -\gamma(f + \langle \sigma_N^z \rangle) \quad (2.10)$$

No estado estacionário:

$$\langle J_L^M \rangle_{NESS} = \langle J_1^M \rangle_{NESS} = \langle J_2^M \rangle_{NESS} = \dots = \langle J_N^M \rangle_{NESS} = \langle J_R^M \rangle_{NESS} \equiv \langle J^M \rangle$$

3.2.2 Fluxo de energia

Reescreve-se o Hamiltoniano (3.7) da seguinte forma:

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} \varepsilon_{i,i+1} = \sum_{i=1}^{N-1} (h_{i,i+1} + b_{i,i+1}),$$

$$h_{i,i+1} \equiv \alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z,$$

$$b_{i,i+1} \equiv \frac{1}{2} [B_i \sigma_i^z (1 + \delta_{i,1}) + B_{i+1} \sigma_{i+1}^z (1 + \delta_{i+1,N})]$$

Tomar Δ *graded* modifica apenas as equações (da seção anterior) quanto à componente XXZ do fluxo de energia. Mostram-se os resultados a seguir, juntamente àqueles para a componente B, os quais são repetidos:

$$\langle J_1^{XXZ} \rangle = -\frac{\gamma}{2} (\langle h_{1,2} \rangle + \Delta_{1,2} \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle) + \gamma f \Delta_{1,2} \langle \sigma_2^z \rangle \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \langle J_i^{XXZ} \rangle = & 2\alpha \langle \alpha(\sigma_{i-1}^y \sigma_i^z \sigma_{i+1}^x - \sigma_{i-1}^x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^y) \\ & + \Delta_{i-1,i} (\sigma_{i-1}^z \sigma_i^x \sigma_{i+1}^y - \sigma_{i-1}^z \sigma_i^y \sigma_{i+1}^x) + \Delta_{i,i+1} (\sigma_{i-1}^x \sigma_i^y \sigma_{i+1}^z \\ & - \sigma_{i-1}^y \sigma_i^x \sigma_{i+1}^z) \rangle, 1 < i < N \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\langle J_N^{XXZ} \rangle = \frac{\gamma}{2} (\langle h_{N-1,N} \rangle + \Delta_{N-1,N} \langle \sigma_{N-1}^z \sigma_N^z \rangle) - \gamma f \Delta_{N-1,N} \langle \sigma_{N-1}^z \rangle \quad (3.10)$$

$$\langle J_1^B \rangle = \gamma B_1 (f - \langle \sigma_1^z \rangle) \quad (3.11)$$

$$\langle J_i^B \rangle = \frac{1}{2} B_i \langle J_{i-1}^M + J_i^M \rangle, 1 < i < N \quad (3.12)$$

$$\langle J_N^B \rangle = -\gamma B_N (f + \langle \sigma_N^z \rangle) \quad (3.13)$$

No estado estacionário:

$$\langle J_1^E \rangle_{NESS} = \langle J_2^E \rangle_{NESS} = \dots = \langle J_N^E \rangle_{NESS} \equiv \langle J^E \rangle$$

3.2.3 Soluções exatas para $N = 3$

Considera-se o Hamiltoniano da seguinte forma:

$$H = \sum_{i=1}^3 B_i \sigma_i^z + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \left[\frac{5}{2} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right],$$

$$B_1 = b - \zeta$$

$$B_2 = b$$

$$B_3 = b + \zeta$$

$$\Delta_{1,2} = \Delta - \delta$$

$$\Delta_{2,3} = \Delta + \delta$$

Por meio do *software* Mathematica[®], obtiveram-se a matriz densidade do sistema no estado estacionário e resultados exatos para os fluxos de energia e magnetização. Tomou-se $\gamma = 1$ e, devido ao grande número de variáveis presentes nesse caso, a fim de reduzir o tempo de cálculo computacional, tomou-se também $\alpha = \frac{5}{2}$ – esse parâmetro, uniforme ao longo da cadeia, pode ser tomado como constante sem comprometer a análise de retificação. Apresentam-se os resultados a seguir:

$$\begin{aligned}
\langle J^M \rangle = & (25f(8(3 - 2f^2)^2\delta^8 + (-3 + 2f^2)\Delta^4(1 + 16\zeta^2)(-14 + f^2 - 24\zeta^2 + 16f^2\zeta^2) \\
& + 2(273 + 220\zeta^2 + 32\zeta^4)^2 + 8f\Delta\zeta(273 + 4588\zeta^2 + 3552\zeta^4 + 512\zeta^6) - 8\delta^6(-93 \\
& + 18\Delta^2 + 24f\Delta\zeta - 16f^3\Delta\zeta + 48\zeta^2 + 8f^4(6 + \Delta^2 + 4\zeta^2) - 2f^2(5 + 12\Delta^2 + 32\zeta^2)) \\
& + \Delta^2(13 + 8\zeta^2)(651 + 2140\zeta^2 + 384\zeta^4 - 4f^2(21 + 436\zeta^2)) - 4f\Delta^3\zeta(297 - 296\zeta^2 \\
& - 768\zeta^4 + 2(f + 16f\zeta^2)^2) + 2\delta^4(5487 + 36\Delta^4 - 1040\zeta^2 - 128\zeta^4 - 32f^3\Delta\zeta(-1 + 2\Delta^2 \\
& + 16\zeta^2) + 8f\Delta\zeta(103 + 12\Delta^2 + 112\zeta^2) + \Delta^2(993 + 672\zeta^2) - 2f^2(973 + 24\Delta^4 + 336\zeta^2 \\
& - 128\zeta^4 + \Delta^2(469 + 384\zeta^2)) + 8f^4(2\Delta^4 + \Delta^2(23 + 32\zeta^2) + 8(9 + 13\zeta^2 + 4\zeta^4))) \\
& + \delta^2(-6\Delta^4(-31 + 96\zeta^2) + \Delta^2(9045 - 17056\zeta^2 - 3840\zeta^4) + 16(5397 + 3086\zeta^2 \\
& + 1064\zeta^4 + 128\zeta^6) - 16f^4\Delta^2(-6 + 108\zeta^2 + 64\zeta^4 + \Delta^2(-1 + 16\zeta^2)) + 8f^3\Delta\zeta(1301 \\
& + 832\zeta^2 + 256\zeta^4 + 4\Delta^2(-27 + 32\zeta^2)) - 8f\Delta\zeta(-3170 + 2576\zeta^2 + 640\zeta^4 + \Delta^2(-187 \\
& + 192\zeta^2)) + 2f^2(\Delta^4(-74 + 384\zeta^2) + \Delta^2(-1487 + 8280\zeta^2 + 1536\zeta^4) - 4(-5151 \\
& + 3170\zeta^2 + 3008\zeta^4 + 512\zeta^6)))))/((96 - 64f^2)\delta^{10} + 4(21 + 4\zeta^2)^2(13 + 8\zeta^2)^3 - 2(-3 \\
& + 2f^2)\Delta^6(1 + 16\zeta^2)^2 + 64f\Delta^5\zeta(-3 - 46\zeta^2 + 32\zeta^4) + 64f\Delta\zeta(-546 - 8903\zeta^2 - 2516\zeta^4 \\
& + 2528\zeta^6 + 512\zeta^8) + 16\delta^8(179 + 46f^4 - 6\Delta^2 - 24f\Delta\zeta - 88\zeta^2 + f^2(-127 + 4\Delta^2 \\
& + 64\zeta^2)) + 32f\Delta^3\zeta(-1098 - 1813\zeta^2 + 2048\zeta^4 - 512\zeta^6 + 5f^2(-1 - 12\zeta^2 + 64\zeta^4)) \\
& + \Delta^4(1 + 16\zeta^2)(2301 + 5176\zeta^2 - 640\zeta^4 + 46f^4(1 + 16\zeta^2) + f^2(-875 - 3968\zeta^2 \\
& + 512\zeta^4)) - 2\Delta^2(-2(60333 + 332540\zeta^2 + 253344\zeta^4 + 47360\zeta^6 + 2048\zeta^8) \\
& + f^2(13377 + 286012\zeta^2 + 158880\zeta^4 + 115712\zeta^6 + 8192\zeta^8)) - 8\delta^6(-4247 + 12\Delta^4 \\
& + 80f^3\Delta\zeta + 960\zeta^2 - 896\zeta^4 + \Delta^2(38 - 384\zeta^2) + 184f^4(6 + \Delta^2 + 4\zeta^2) - 4f\Delta\zeta(87 + 8\Delta^2 \\
& + 128\zeta^2) - 2f^2(-323 + 4\Delta^4 + 740\zeta^2 - 384\zeta^4 + \Delta^2(352 - 96\zeta^2))) + 4\delta^4(100115 \\
& + 24\Delta^6 - 19256\zeta^2 - 11136\zeta^4 - 3072\zeta^6 + 4\Delta^4(323 + 8\zeta^2) + \Delta^2(19182 + 3696\zeta^2 \\
& - 4864\zeta^4) + 160f^3\Delta\zeta(\Delta^2 + 8(4 + \zeta^2)) + 8f\Delta\zeta(-695 + 4\Delta^4 + 356\zeta^2 - 384\zeta^4 - 2\Delta^2(7 \\
& + 48\zeta^2)) - 2f^2(7279 + 446\Delta^4 + 8\Delta^6 + 11600\zeta^2 - 352\zeta^4 - 2048\zeta^6 + \Delta^2(5495 \\
& + 8240\zeta^2 - 1024\zeta^4)) + 92f^4(2\Delta^4 + \Delta^2(23 + 32\zeta^2) + 8(9 + 13\zeta^2 + 4\zeta^4))) \\
& - 2\delta^2(24\Delta^6(-1 + 16\zeta^2) + \Delta^4(-5251 + 21120\zeta^2 - 1792\zeta^4) - 4\Delta^2(41855 - 89472\zeta^2 \\
& - 11680\zeta^4 + 4096\zeta^6) + 4(-305487 - 297504\zeta^2 - 68432\zeta^4 + 1024\zeta^6 + 1024\zeta^8) \\
& + 184f^4\Delta^2(-6 + 108\zeta^2 + 64\zeta^4 + \Delta^2(-1 + 16\zeta^2)) + 20f^3\Delta\zeta(-7169 - 1408\zeta^2 + 256\zeta^4 \\
& + 4\Delta^2(103 + 32\zeta^2)) + 4f\Delta\zeta(4\Delta^4(-27 + 32\zeta^2) - 3\Delta^2(1947 - 608\zeta^2 + 512\zeta^4) \\
& + 2(-10649 + 564\zeta^2 + 8160\zeta^4)) - 2f^2(8\Delta^6(-1 + 16\zeta^2) + \Delta^4(-1099 + 7696\zeta^2 \\
& - 768\zeta^4) + \Delta^2(-17558 + 93820\zeta^2 + 56832\zeta^4 - 2048\zeta^6) - 4(-66081 + 11006\zeta^2 \\
& + 13104\zeta^4 + 4416\zeta^6 + 1024\zeta^8)))))) \tag{3.14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle J^E \rangle = & (25f(\delta(100f^4\Delta\zeta(4\delta^4 - 2\delta^2(15 + 2\Delta^2 + 8\zeta^2) + \Delta^2(5 + 16\zeta^2)) - 4\Delta\zeta(-5691 + 150\Delta^4 + 47804\zeta^2 \\
& + 30816\zeta^4 + 4096\zeta^6 - 75\Delta^2(-35 + 16\zeta^2) + 2\delta^4(947 + 128\zeta^2) - \delta^2(-9097 + 100\Delta^2 \\
& + 11824\zeta^2 + 2048\zeta^4)) + 2f^2\Delta\zeta(-40341 + 64\delta^6 + 200\Delta^4 + 45404\zeta^2 + 31616\zeta^4 \\
& + 4096\zeta^6 - 16\delta^4(-61 + 4\Delta^2 + 16\zeta^2) + \Delta^2(2821 - 6528\zeta^2 - 1024\zeta^4) + \delta^2(4451 \\
& - 4896\zeta^2 - 1024\zeta^4 + 16\Delta^2(23 + 32\zeta^2))) + f^3(32\delta^8 - 16\delta^6(7 + 4\Delta^2 + 24\zeta^2) \\
& + 2\delta^4(-231 + 16\Delta^4 + 1312\zeta^2 + 768\zeta^4 + 4\Delta^2(-13 + 80\zeta^2)) - 4\delta^2(27 + 1666\zeta^2 \\
& + 2176\zeta^4 + 512\zeta^6 + \Delta^4(-54 + 64\zeta^2) + \Delta^2(-415 + 472\zeta^2 + 512\zeta^4)) + \Delta^2(1983 \\
& - 19136\zeta^2 - 4096\zeta^4 + 2048\zeta^6 + \Delta^2(52 + 864\zeta^2 + 512\zeta^4))) - f(48\delta^8 - 8\delta^6(-71 \\
& + 12\Delta^2 + 80\zeta^2) + (21 + 4\zeta^2)^2(1 + 832\zeta^2 + 256\zeta^4) + \Delta^4(-597 + 2896\zeta^2 + 768\zeta^4) \\
& + \Delta^2(-11625 + 32632\zeta^2 + 18624\zeta^4 + 8192\zeta^6) + \delta^4(1931 + 48\Delta^4 + 704\zeta^2 + 3072\zeta^4 \\
& + 4\Delta^2(313 + 320\zeta^2)) - 4\delta^2(-553 + 6708\zeta^2 + 6496\zeta^4 + 1536\zeta^6 + \Delta^4(-31 + 96\zeta^2) \\
& + \Delta^2(-1111 + 3184\zeta^2 + 1408\zeta^4))) + 2b(8(3 - 2f^2)^2\delta^8 + (-3 + 2f^2)\Delta^4(1 \\
& + 16\zeta^2)(-14 + f^2 - 24\zeta^2 + 16f^2\zeta^2) + 2(273 + 220\zeta^2 + 32\zeta^4)^2 + 8f\Delta\zeta(273 + 4588\zeta^2 \\
& + 3552\zeta^4 + 512\zeta^6) - 8\delta^6(-93 + 18\Delta^2 + 24f\Delta\zeta - 16f^3\Delta\zeta + 48\zeta^2 + 8f^4(6 + \Delta^2 + 4\zeta^2) \\
& - 2f^2(5 + 12\Delta^2 + 32\zeta^2)) + \Delta^2(13 + 8\zeta^2)(651 + 2140\zeta^2 + 384\zeta^4 - 4f^2(21 + 436\zeta^2)) \\
& - 4f\Delta^3\zeta(297 - 296\zeta^2 - 768\zeta^4 + 2(f + 16f\zeta^2)^2) + 2\delta^4(5487 + 36\Delta^4 - 1040\zeta^2 - 128\zeta^4 \\
& - 32f^3\Delta\zeta(-1 + 2\Delta^2 + 16\zeta^2) + 8f\Delta\zeta(103 + 12\Delta^2 + 112\zeta^2) + \Delta^2(993 + 672\zeta^2) \\
& - 2f^2(973 + 24\Delta^4 + 336\zeta^2 - 128\zeta^4 + \Delta^2(469 + 384\zeta^2)) + 8f^4(2\Delta^4 + \Delta^2(23 + 32\zeta^2) \\
& + 8(9 + 13\zeta^2 + 4\zeta^4))) + \delta^2(-6\Delta^4(-31 + 96\zeta^2) + \Delta^2(9045 - 17056\zeta^2 - 3840\zeta^4) \\
& + 16(5397 + 3086\zeta^2 + 1064\zeta^4 + 128\zeta^6) - 16f^4\Delta^2(-6 + 108\zeta^2 + 64\zeta^4 + \Delta^2(-1 \\
& + 16\zeta^2)) + 8f^3\Delta\zeta(1301 + 832\zeta^2 + 256\zeta^4 + 4\Delta^2(-27 + 32\zeta^2)) - 8f\Delta\zeta(-3170 \\
& + 2576\zeta^2 + 640\zeta^4 + \Delta^2(-187 + 192\zeta^2)) + 2f^2(\Delta^4(-74 + 384\zeta^2) + \Delta^2(-1487 \\
& + 8280\zeta^2 + 1536\zeta^4) - 4(-5151 + 3170\zeta^2 + 3008\zeta^4 + 512\zeta^6)))))/(2((96 - 64f^2)\delta^{10} \\
& + 4(21 + 4\zeta^2)^2(13 + 8\zeta^2)^3 - 2(-3 + 2f^2)\Delta^6(1 + 16\zeta^2)^2 + 64f\Delta^5\zeta(-3 - 46\zeta^2 + 32\zeta^4) \\
& + 64f\Delta\zeta(-546 - 8903\zeta^2 - 2516\zeta^4 + 2528\zeta^6 + 512\zeta^8) + 16\delta^8(179 + 46f^4 - 6\Delta^2 \\
& - 24f\Delta\zeta - 88\zeta^2 + f^2(-127 + 4\Delta^2 + 64\zeta^2)) + 32f\Delta^3\zeta(-1098 - 1813\zeta^2 + 2048\zeta^4 \\
& - 512\zeta^6 + 5f^2(-1 - 12\zeta^2 + 64\zeta^4)) + \Delta^4(1 + 16\zeta^2)(2301 + 5176\zeta^2 - 640\zeta^4 + 46f^4(1 \\
& + 16\zeta^2) + f^2(-875 - 3968\zeta^2 + 512\zeta^4)) - 2\Delta^2(-2(60333 + 332540\zeta^2 + 253344\zeta^4 \\
& + 47360\zeta^6 + 2048\zeta^8) + f^2(13377 + 286012\zeta^2 + 158880\zeta^4 + 115712\zeta^6 + 8192\zeta^8)) \\
& - 8\delta^6(-4247 + 12\Delta^4 + 80f^3\Delta\zeta + 960\zeta^2 - 896\zeta^4 + \Delta^2(38 - 384\zeta^2) + 184f^4(6 + \Delta^2 \\
& + 4\zeta^2) - 4f\Delta\zeta(87 + 8\Delta^2 + 128\zeta^2) - 2f^2(-323 + 4\Delta^4 + 740\zeta^2 - 384\zeta^4 + \Delta^2(352 \\
& - 96\zeta^2))) + 4\delta^4(100115 + 24\Delta^6 - 19256\zeta^2 - 11136\zeta^4 - 3072\zeta^6 + 4\Delta^4(323 + 8\zeta^2) \\
& + \Delta^2(19182 + 3696\zeta^2 - 4864\zeta^4) + 160f^3\Delta\zeta(\Delta^2 + 8(4 + \zeta^2)) + 8f\Delta\zeta(-695 + 4\Delta^4 \\
& + 356\zeta^2 - 384\zeta^4 - 2\Delta^2(7 + 48\zeta^2)) - 2f^2(7279 + 446\Delta^4 + 8\Delta^6 + 11600\zeta^2 - 352\zeta^4 \\
& - 2048\zeta^6 + \Delta^2(5495 + 8240\zeta^2 - 1024\zeta^4)) + 92f^4(2\Delta^4 + \Delta^2(23 + 32\zeta^2) + 8(9 + 13\zeta^2 \\
& + 4\zeta^4))) - 2\delta^2(24\Delta^6(-1 + 16\zeta^2) + \Delta^4(-5251 + 21120\zeta^2 - 1792\zeta^4) - 4\Delta^2(41855 \\
& - 89472\zeta^2 - 11680\zeta^4 + 4096\zeta^6) + 4(-305487 - 297504\zeta^2 - 68432\zeta^4 + 1024\zeta^6 \\
& + 1024\zeta^8) + 184f^4\Delta^2(-6 + 108\zeta^2 + 64\zeta^4 + \Delta^2(-1 + 16\zeta^2)) + 20f^3\Delta\zeta(-7169 \\
& - 1408\zeta^2 + 256\zeta^4 + 4\Delta^2(103 + 32\zeta^2)) + 4f\Delta\zeta(4\Delta^4(-27 + 32\zeta^2) - 3\Delta^2(1947 - 608\zeta^2 \\
& + 512\zeta^4) + 2(-10649 + 564\zeta^2 + 8160\zeta^4)) - 2f^2(8\Delta^6(-1 + 16\zeta^2) + \Delta^4(-1099 \\
& + 7696\zeta^2 - 768\zeta^4) + \Delta^2(-17558 + 93820\zeta^2 + 56832\zeta^4 - 2048\zeta^6) - 4(-66081 \\
& + 11006\zeta^2 + 13104\zeta^4 + 4416\zeta^6 + 1024\zeta^8)))))) \quad (3.15)
\end{aligned}$$

As expressões (3.14) e (3.15) fornecem os fluxos para o sistema mais geral no contexto deste trabalho – com assimetrias, simultaneamente, no campo magnético e na cadeia. Com o propósito de mitigar a obscuridade suscitada pelo tamanho dessas expressões, apresentam-se as expansões em séries de Maclaurin de $\langle J^M \rangle$ e $\langle J^E \rangle$ até a primeira ordem não nula dos parâmetros de assimetria δ e ζ .

Expansão de $\langle J^M \rangle$ em torno de $\delta = 0$:

$$\langle J^M \rangle = [\langle J^M \rangle]_0^\delta + [\langle J^M \rangle]_2^\delta \delta^2 + \dots$$

$$[\langle J^M \rangle]_0^\delta = 25f(-273 - 220\zeta^2 - 32\zeta^4 - 4f\Delta\zeta(13 + 8\zeta^2) + \Delta^2(-14 + f^2 - 24\zeta^2 + 16f^2\zeta^2))/(-2(21 + 4\zeta^2)(13 + 8\zeta^2)^2 - 2\Delta^4(1 + 16\zeta^2) + 32f\Delta\zeta(-37 + 33\zeta^2) + \Delta^2(-403 - 1432\zeta^2 + 256\zeta^4 + 23f^2(1 + 16\zeta^2)))$$

$$[\langle J^M \rangle]_2^\delta = -25f(8(21 + 4\zeta^2)^2(13 + 8\zeta^2)^3(-7 + 20\zeta^2) + 300\Delta^8(-1 + 48\zeta^2) - 4\Delta^6(16771 - 206992\zeta^2 + 73728\zeta^4 + 9216\zeta^6) + 16f^5\Delta^3\zeta(2889 + 200\Delta^2 + 31872\zeta^2 + 93952\zeta^4 + 57344\zeta^6) - \Delta^4(2416739 - 17934592\zeta^2 + 5209280\zeta^4 + 648192\zeta^6 + 147456\zeta^8) - 2\Delta^2(13312299 - 71752580\zeta^2 - 1493696\zeta^4 + 37139712\zeta^6 + 15388672\zeta^8 + 1671168\zeta^{10}) - 8f^3\Delta\zeta(1324827 + 3055092\zeta^2 - 15379104\zeta^4 - 10793984\zeta^6 - 2510848\zeta^8 - 196608\zeta^{10} + 100\Delta^6(-1 + 48\zeta^2) - 32\Delta^4(-121 - 733\zeta^2 + 2872\zeta^4 + 384\zeta^6) + \Delta^2(216987 - 1603832\zeta^2 + 1943232\zeta^4 + 580608\zeta^6 - 32768\zeta^8)) - 2f^4\Delta^2(8\Delta^4(-31 + 612\zeta^2 + 4992\zeta^4 + 1024\zeta^6) - 25\Delta^2(381 - 7712\zeta^2 + 2560\zeta^4 + 4096\zeta^6) + 4(-23517 + 170202\zeta^2 + 2192032\zeta^4 + 1462144\zeta^6 + 757760\zeta^8 + 98304\zeta^{10})) + 8f\Delta\zeta(50\Delta^6(-29 + 192\zeta^2) - 4\Delta^4(17573 - 76496\zeta^2 + 34464\zeta^4 + 4608\zeta^6) - \Delta^2(125729 - 2337480\zeta^2 + 677216\zeta^4 + 217088\zeta^6 + 114688\zeta^8) - 2(-6790539 + 10009856\zeta^2 + 14894128\zeta^4 + 8249088\zeta^6 + 1883136\zeta^8 + 147456\zeta^{10})) + f^2(-200\Delta^8(-1 + 48\zeta^2) + 32\Delta^6(341 - 12407\zeta^2 + 13488\zeta^4 + 1536\zeta^6) + \Delta^4(143551 - 2317376\zeta^2 + 4658816\zeta^4 - 1601536\zeta^6 - 98304\zeta^8) - 96(21 + 4\zeta^2)^2(-91 - 1174\zeta^2 + 4824\zeta^4 + 5056\zeta^6 + 1024\zeta^8) + 4\Delta^2(81591 + 14039060\zeta^2 - 12988304\zeta^4 + 10843008\zeta^6 + 6821888\zeta^8 + 786432\zeta^{10}))/((32f\Delta\zeta(3 - 2\zeta^2) + (-3 + 2f^2)\Delta^2(1 + 16\zeta^2) - 2(273 + 220\zeta^2 + 32\zeta^4))(2(21 + 4\zeta^2)(13 + 8\zeta^2)^2 + \Delta^4(2 + 32\zeta^2) - 32f\Delta\zeta(-37 + 33\zeta^2) + \Delta^2(403 + 1432\zeta^2 - 256\zeta^4 - 23f^2(1 + 16\zeta^2))))^2)$$

Expansão de $\langle J^M \rangle$ em torno de $\zeta = 0$:

$$\langle J^M \rangle = [J^M]_0^\zeta + [J^M]_1^\zeta \zeta + \dots$$

$$\begin{aligned} [J^M]_0^\zeta = & 25f(149058 + 8(3 - 2f^2)^2\delta^8 - 273(-31 + 4f^2)\Delta^2 + (42 - 31f^2 + 2f^4)\Delta^4 - 8(-3 \\ & + 2f^2)\delta^6(31 - 6\Delta^2 + 4f^2(6 + \Delta^2)) + 2\delta^4(5487 + 993\Delta^2 + 36\Delta^4 + 8f^4(72 + 23\Delta^2 \\ & + 2\Delta^4) - 2f^2(973 + 469\Delta^2 + 24\Delta^4)) + \delta^2(86352 + 9045\Delta^2 + 186\Delta^4 + 16f^4\Delta^2(6 + \Delta^2) \\ & - 2f^2(-20604 + 1487\Delta^2 + 74\Delta^4)))/(3875508 + (96 - 64f^2)\delta^{10} - 546(-442 \\ & + 49f^2)\Delta^2 + (2301 - 875f^2 + 46f^4)\Delta^4 + (6 - 4f^2)\Delta^6 + 16\delta^8(179 + 46f^4 - 6\Delta^2 \\ & + f^2(-127 + 4\Delta^2)) - 8\delta^6(-4247 + 38\Delta^2 + 12\Delta^4 + 184f^4(6 + \Delta^2) + f^2(646 - 704\Delta^2 \\ & - 8\Delta^4)) + 4\delta^4(100115 + 19182\Delta^2 + 1292\Delta^4 + 24\Delta^6 + 92f^4(72 + 23\Delta^2 + 2\Delta^4) \\ & - 2f^2(7279 + 5495\Delta^2 + 446\Delta^4 + 8\Delta^6)) + 2\delta^2(1221948 + 167420\Delta^2 + 5251\Delta^4 + 24\Delta^6 \\ & + 184f^4\Delta^2(6 + \Delta^2) - 2f^2(-264324 + 17558\Delta^2 + 1099\Delta^4 + 8\Delta^6))) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [J^M]_1^\zeta = & 100f^2\Delta(256(3 - 2f^2)^2\delta^{16} + (-546 + (-3 + 2f^2)\Delta^2)^2(11466 - 3(-365 + f^2)\Delta^2 + 26\Delta^4) \\ & + 64(-3 + 2f^2)\delta^{14}(399 + 224f^4 + 48\Delta^2 - 2f^2(519 + 16\Delta^2)) - 128\delta^{12}(-8545 \\ & - 3123\Delta^2 - 108\Delta^4 + 12f^6(323 + 56\Delta^2) - 4f^4(2779 + 1016\Delta^2 + 12\Delta^4) + f^2(6443 \\ & + 6666\Delta^2 + 144\Delta^4)) + 16\delta^{10}(24f^6(6453 + 2476\Delta^2 + 224\Delta^4) - 2f^4(185241 \\ & + 140372\Delta^2 + 15792\Delta^4 + 128\Delta^6) - 3(-306413 + 94126\Delta^2 + 11520\Delta^4 + 192\Delta^6) \\ & + f^2(783891 + 565104\Delta^2 + 58320\Delta^4 + 768\Delta^6)) - 8\delta^8(-31101960 - 5496881\Delta^2 \\ & - 713310\Delta^4 - 26640\Delta^6 - 288\Delta^8 + 8f^6(14472 + 25179\Delta^2 + 6456\Delta^4 + 448\Delta^6) \\ & - 8f^4(290697 + 193764\Delta^2 + 44633\Delta^4 + 2400\Delta^6 + 16\Delta^8) + 8f^2(1341771 + 167362\Delta^2 \\ & + 108440\Delta^4 + 4812\Delta^6 + 48\Delta^8)) - 2\delta^4(-7278021324 - 1014380972\Delta^2 - 33576005\Delta^4 \\ & + 401200\Delta^6 + 24168\Delta^8 + 96f^6\Delta^2(5958 + 1472\Delta^2 + 81\Delta^4) + f^2(-2174719584 \\ & + 307960713\Delta^2 + 30362300\Delta^4 + 430664\Delta^6 - 12224\Delta^8) - 2f^4(-44646660 \\ & - 754317\Delta^2 + 1529698\Delta^4 + 76320\Delta^6 + 1296\Delta^8)) - 2\delta^2(4f^6\Delta^4(3033 + 224\Delta^2) \\ & - 2f^4\Delta^2(2562381 + 495402\Delta^2 + 20860\Delta^4 + 316\Delta^6) + f^2(-167690250 \\ & + 171334995\Delta^2 + 11523979\Delta^4 + 115584\Delta^6 - 3104\Delta^8) + 3(-3385030740 \\ & - 195369664\Delta^2 + 6082689\Delta^4 + 407490\Delta^6 + 2026\Delta^8)) - 4\delta^6(-823437974 \\ & - 176665727\Delta^2 - 12658525\Delta^4 - 386320\Delta^6 - 4176\Delta^8 + 48f^6(71064 + 30153\Delta^2 \\ & + 4432\Delta^4 + 216\Delta^6) - 2f^4(5520843 + 2884707\Delta^2 + 608734\Delta^4 + 25920\Delta^6 + 928\Delta^8) \\ & + f^2(-114827207 + 66033007\Delta^2 + 8166080\Delta^4 + 325312\Delta^6 \\ & + 5568\Delta^8))) \\ & /(-3875508 + 32(-3 + 2f^2)\delta^{10} + 546(-442 + 49f^2)\Delta^2 + (-2301 + 875f^2 - 46f^4)\Delta^4 \\ & + (-6 + 4f^2)\Delta^6 - 16\delta^8(179 + 46f^4 - 6\Delta^2 + f^2(-127 + 4\Delta^2)) + 8\delta^6(-4247 + 38\Delta^2 \\ & + 12\Delta^4 + 184f^4(6 + \Delta^2) + f^2(646 - 704\Delta^2 - 8\Delta^4)) - 4\delta^4(100115 + 19182\Delta^2 \\ & + 1292\Delta^4 + 24\Delta^6 + 92f^4(72 + 23\Delta^2 + 2\Delta^4) - 2f^2(7279 + 5495\Delta^2 + 446\Delta^4 + 8\Delta^6)) \\ & - 2\delta^2(1221948 + 167420\Delta^2 + 5251\Delta^4 + 24\Delta^6 + 184f^4\Delta^2(6 + \Delta^2) - 2f^2(-264324 \\ & + 17558\Delta^2 + 1099\Delta^4 + 8\Delta^6)))^2 \end{aligned}$$

Expansão de $\langle J^E \rangle$ em torno de $\delta = 0$:

$$\langle J^E \rangle = [\langle J^E \rangle]_0^\delta + [\langle J^E \rangle]_1^\delta \delta + \dots$$

$$[\langle J^E \rangle]_0^\delta = 25bf(-273 - 220\zeta^2 - 32\zeta^4 - 4f\Delta\zeta(13 + 8\zeta^2) + \Delta^2(-14 + f^2 - 24\zeta^2 + 16f^2\zeta^2))/(-2(21 + 4\zeta^2)(13 + 8\zeta^2)^2 - 2\Delta^4(1 + 16\zeta^2) + 32f\Delta\zeta(-37 + 33\zeta^2) + \Delta^2(-403 - 1432\zeta^2 + 256\zeta^4 + 23f^2(1 + 16\zeta^2)))$$

$$[\langle J^E \rangle]_1^\delta = 25f(100f^4\Delta^3\zeta(5 + 16\zeta^2) - 4\Delta\zeta(-5691 + 150\Delta^4 + 47804\zeta^2 + 30816\zeta^4 + 4096\zeta^6 - 75\Delta^2(-35 + 16\zeta^2)) + 2f^2\Delta\zeta(-40341 + 200\Delta^4 + 45404\zeta^2 + 31616\zeta^4 + 4096\zeta^6 + \Delta^2(2821 - 6528\zeta^2 - 1024\zeta^4)) + f^3\Delta^2(1983 - 19136\zeta^2 - 4096\zeta^4 + 2048\zeta^6 + \Delta^2(52 + 864\zeta^2 + 512\zeta^4)) - f((21 + 4\zeta^2)^2(1 + 832\zeta^2 + 256\zeta^4) + \Delta^4(-597 + 2896\zeta^2 + 768\zeta^4) + \Delta^2(-11625 + 32632\zeta^2 + 18624\zeta^4 + 8192\zeta^6)))/(2(4(21 + 4\zeta^2)^2(13 + 8\zeta^2)^3 - 2(-3 + 2f^2)\Delta^6(1 + 16\zeta^2)^2 + 64f\Delta^5\zeta(-3 - 46\zeta^2 + 32\zeta^4) + 64f\Delta\zeta(-546 - 8903\zeta^2 - 2516\zeta^4 + 2528\zeta^6 + 512\zeta^8) + 32f\Delta^3\zeta(-1098 - 1813\zeta^2 + 2048\zeta^4 - 512\zeta^6 + 5f^2(-1 - 12\zeta^2 + 64\zeta^4)) + \Delta^4(1 + 16\zeta^2)(2301 + 5176\zeta^2 - 640\zeta^4 + 46f^4(1 + 16\zeta^2) + f^2(-875 - 3968\zeta^2 + 512\zeta^4)) - 2\Delta^2(-2(60333 + 332540\zeta^2 + 253344\zeta^4 + 47360\zeta^6 + 2048\zeta^8) + f^2(13377 + 286012\zeta^2 + 158880\zeta^4 + 115712\zeta^6 + 8192\zeta^8))))$$

Expansão de $\langle J^E \rangle$ em torno de $\zeta = 0$:

$$\langle J^E \rangle = [\langle J^E \rangle]_0^\zeta + [\langle J^E \rangle]_1^\zeta \zeta + \dots$$

$$\begin{aligned}
[(J^E)]_0^\zeta &= 25f(f\delta(-441 + 16(-3 + 2f^2)\delta^8 + 3(3875 + 661f^2)\Delta^2 + (597 + 52f^2)\Delta^4 - 8\delta^6(71 - 12\Delta^2 \\
&\quad + 2f^2(7 + 4\Delta^2)) + \delta^4(-1931 - 1252\Delta^2 - 48\Delta^4 + 2f^2(-231 - 52\Delta^2 + 16\Delta^4)) \\
&\quad + 4\delta^2(-553 - 1111\Delta^2 - 31\Delta^4 + f^2(-27 + 415\Delta^2 + 54\Delta^4))) + 2b(149058 \\
&\quad + 8(3 - 2f^2)^2\delta^8 - 273(-31 + 4f^2)\Delta^2 + (42 - 31f^2 + 2f^4)\Delta^4 - 8(-3 + 2f^2)\delta^6(31 \\
&\quad - 6\Delta^2 + 4f^2(6 + \Delta^2)) + 2\delta^4(5487 + 993\Delta^2 + 36\Delta^4 + 8f^4(72 + 23\Delta^2 + 2\Delta^4) - 2f^2(973 \\
&\quad + 469\Delta^2 + 24\Delta^4)) + \delta^2(86352 + 9045\Delta^2 + 186\Delta^4 + 16f^4\Delta^2(6 + \Delta^2) - 2f^2(-20604 \\
&\quad + 1487\Delta^2 + 74\Delta^4)))/((2(3875508 + (96 - 64f^2)\delta^{10} - 546(-442 + 49f^2)\Delta^2 + (2301 \\
&\quad - 875f^2 + 46f^4)\Delta^4 + (6 - 4f^2)\Delta^6 + 16\delta^8(179 + 46f^4 - 6\Delta^2 + f^2(-127 + 4\Delta^2)) \\
&\quad - 8\delta^6(-4247 + 38\Delta^2 + 12\Delta^4 + 184f^4(6 + \Delta^2) + f^2(646 - 704\Delta^2 - 8\Delta^4)) \\
&\quad + 4\delta^4(100115 + 19182\Delta^2 + 1292\Delta^4 + 24\Delta^6 + 92f^4(72 + 23\Delta^2 + 2\Delta^4) - 2f^2(7279 \\
&\quad + 5495\Delta^2 + 446\Delta^4 + 8\Delta^6)) + 2\delta^2(1221948 + 167420\Delta^2 + 5251\Delta^4 + 24\Delta^6 + 184f^4\Delta^2(6 \\
&\quad + \Delta^2) - 2f^2(-264324 + 17558\Delta^2 + 1099\Delta^4 + 8\Delta^6))))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[(J^E)]_1^\zeta &= 25f((3875508 + (96 - 64f^2)\delta^{10} - 546(-442 + 49f^2)\Delta^2 + (2301 - 875f^2 + 46f^4)\Delta^4 + (6 \\
&\quad - 4f^2)\Delta^6 + 16\delta^8(179 + 46f^4 - 6\Delta^2 + f^2(-127 + 4\Delta^2)) - 8\delta^6(-4247 + 38\Delta^2 + 12\Delta^4 \\
&\quad + 184f^4(6 + \Delta^2) + f^2(646 - 704\Delta^2 - 8\Delta^4)) + 4\delta^4(100115 + 19182\Delta^2 + 1292\Delta^4 \\
&\quad + 24\Delta^6 + 92f^4(72 + 23\Delta^2 + 2\Delta^4) - 2f^2(7279 + 5495\Delta^2 + 446\Delta^4 + 8\Delta^6)) \\
&\quad + 2\delta^2(1221948 + 167420\Delta^2 + 5251\Delta^4 + 24\Delta^6 + 184f^4\Delta^2(6 + \Delta^2) - 2f^2(-264324 \\
&\quad + 17558\Delta^2 + 1099\Delta^4 + 8\Delta^6)))(-8bf\Delta(-546 + (48 - 32f^2)\delta^6 + (297 + 2f^2)\Delta^2 \\
&\quad + 4\delta^4(-103 - 12\Delta^2 + f^2(-4 + 8\Delta^2)) + \delta^2(-6340 - 374\Delta^2 + f^2(-2602 + 216\Delta^2))) \\
&\quad + 2\delta\Delta(50f^4(4\delta^4 + 5\Delta^2 - 2\delta^2(15 + 2\Delta^2)) + f^2(-40341 + 64\delta^6 + 2821\Delta^2 + 200\Delta^4 \\
&\quad + \delta^4(976 - 64\Delta^2) + \delta^2(4451 + 368\Delta^2)) - 2(1894\delta^4 + \delta^2(9097 - 100\Delta^2) + 3(-1897 \\
&\quad + 875\Delta^2 + 50\Delta^4))) - 8f\Delta(-48\delta^8 + \delta^6(348 - 80f^2 + 32\Delta^2) - 4(1092 + (1098 \\
&\quad + 5f^2)\Delta^2 + 6\Delta^4) + 4\delta^4(-695 - 14\Delta^2 + 4\Delta^4 + 20f^2(32 + \Delta^2)) + \delta^2(21298 + 5841\Delta^2 \\
&\quad + 108\Delta^4 - 5f^2(-7169 + 412\Delta^2)))(f\delta(-441 + 16(-3 + 2f^2)\delta^8 + 3(3875 + 661f^2)\Delta^2 \\
&\quad + (597 + 52f^2)\Delta^4 - 8\delta^6(71 - 12\Delta^2 + 2f^2(7 + 4\Delta^2)) + \delta^4(-1931 - 1252\Delta^2 - 48\Delta^4 \\
&\quad + 2f^2(-231 - 52\Delta^2 + 16\Delta^4)) + 4\delta^2(-553 - 1111\Delta^2 - 31\Delta^4 + f^2(-27 + 415\Delta^2 \\
&\quad + 54\Delta^4))) + 2b(149058 + 8(3 - 2f^2)^2\delta^8 - 273(-31 + 4f^2)\Delta^2 + (42 - 31f^2 + 2f^4)\Delta^4 \\
&\quad - 8(-3 + 2f^2)\delta^6(31 - 6\Delta^2 + 4f^2(6 + \Delta^2)) + 2\delta^4(5487 + 993\Delta^2 + 36\Delta^4 + 8f^4(72 \\
&\quad + 23\Delta^2 + 2\Delta^4) - 2f^2(973 + 469\Delta^2 + 24\Delta^4)) + \delta^2(86352 + 9045\Delta^2 + 186\Delta^4 \\
&\quad + 16f^4\Delta^2(6 + \Delta^2) - 2f^2(-20604 + 1487\Delta^2 \\
&\quad + 74\Delta^4)))) \\
&\quad /((2(3875508 + (96 - 64f^2)\delta^{10} - 546(-442 + 49f^2)\Delta^2 + (2301 - 875f^2 + 46f^4)\Delta^4 \\
&\quad + (6 - 4f^2)\Delta^6 + 16\delta^8(179 + 46f^4 - 6\Delta^2 + f^2(-127 + 4\Delta^2)) - 8\delta^6(-4247 + 38\Delta^2 \\
&\quad + 12\Delta^4 + 184f^4(6 + \Delta^2) + f^2(646 - 704\Delta^2 - 8\Delta^4)) + 4\delta^4(100115 + 19182\Delta^2 \\
&\quad + 1292\Delta^4 + 24\Delta^6 + 92f^4(72 + 23\Delta^2 + 2\Delta^4) - 2f^2(7279 + 5495\Delta^2 + 446\Delta^4 + 8\Delta^6)) \\
&\quad + 2\delta^2(1221948 + 167420\Delta^2 + 5251\Delta^4 + 24\Delta^6 + 184f^4\Delta^2(6 + \Delta^2) - 2f^2(-264324 \\
&\quad + 17558\Delta^2 + 1099\Delta^4 + 8\Delta^6))))^2)
\end{aligned}$$

O GRAF. 8 mostra o fluxo de magnetização para $\zeta = 0$. Recupera-se o caso, apresentado no capítulo anterior, em que o campo magnético externo era uniforme e não havia retificação quanto ao fluxo de magnetização.

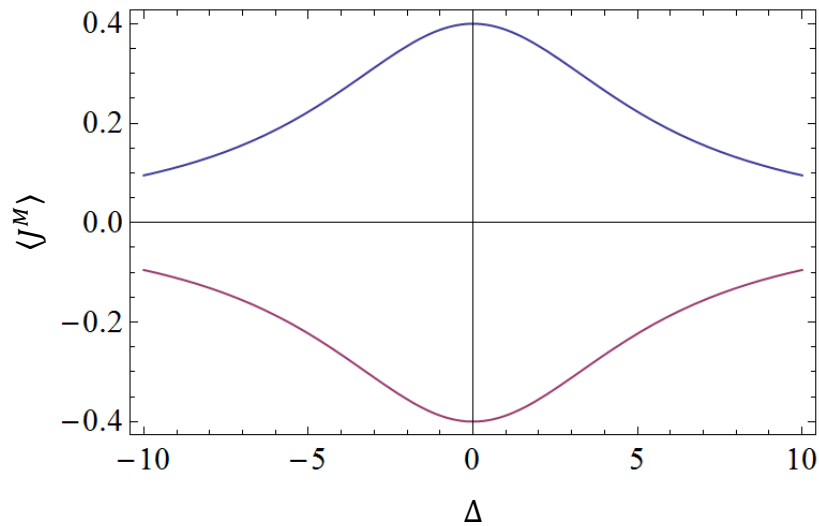


GRÁFICO 8 - Fluxo de magnetização em função de Δ para $f = \frac{1}{2}$, $\zeta = 0$ e $\delta = 2$ (em azul). A curva em roxo segue fazendo-se $f \rightarrow -f$.

O GRAF. 9 mostra um caso típico do fluxo de magnetização (para $\zeta \neq 0$). A existência de retificação é evidente. Nota-se que o fluxo, para cada Δ , é menor, em módulo, para $\zeta \neq 0$.

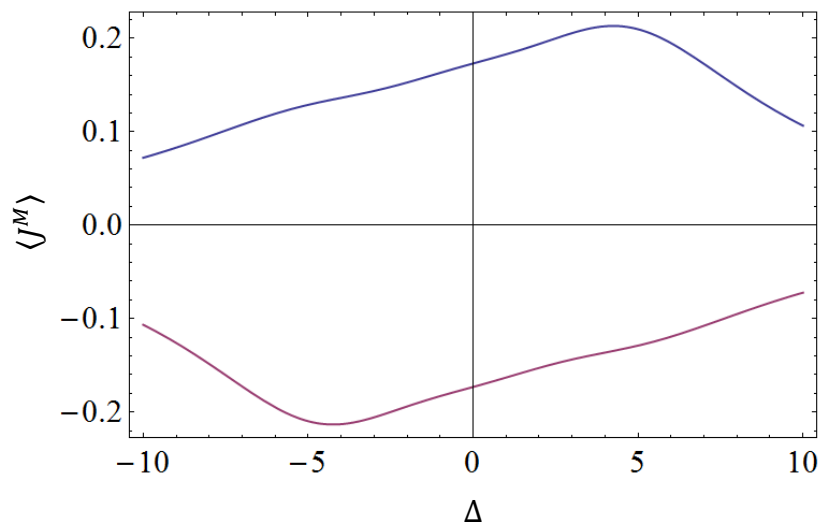


GRÁFICO 9 - Fluxo de magnetização em função de Δ para $f = \frac{1}{2}$, $\zeta = 2$ e $\delta = 2$ (em azul). A curva em roxo segue fazendo-se $f \rightarrow -f$.

O fluxo para o sistema com os reservatórios invertidos (em roxo) pode ser obtido a partir daquele para o sistema original (em azul) por meio de uma reflexão em relação ao eixo horizontal seguida de uma em relação ao eixo vertical – ou seja: $\langle J^M \rangle(\Delta, f) = -\langle J^M \rangle(-\Delta, -f)$. Esse resultado era válido para Δ não *graded* e permanece válido aqui.

Analisando-se, em conjunto, todos os casos apresentados, fica claro que o sistema apresenta retificação quanto ao fluxo de magnetização apenas quando o campo magnético é não uniforme. Um campo magnético uniforme – e, no presente caso, a parte uniforme do campo magnético (*b*) – sequer tem influência sobre esse fluxo.

Com o intuito de se obter uma medida para a retificação quanto ao fluxo de magnetização, constrói-se – em total analogia com o coeficiente de retificação de energia, introduzido no capítulo anterior – o coeficiente de retificação de magnetização. Esse coeficiente é definido como:

$$R_M \equiv 100\% \times \frac{||\langle J^M \rangle| - |\langle J^M \rangle_I||}{\min\{|\langle J^M \rangle|, |\langle J^M \rangle_I\}}$$

O GRAF. 10 (a) mostra R_M em função de Δ para um caso típico.

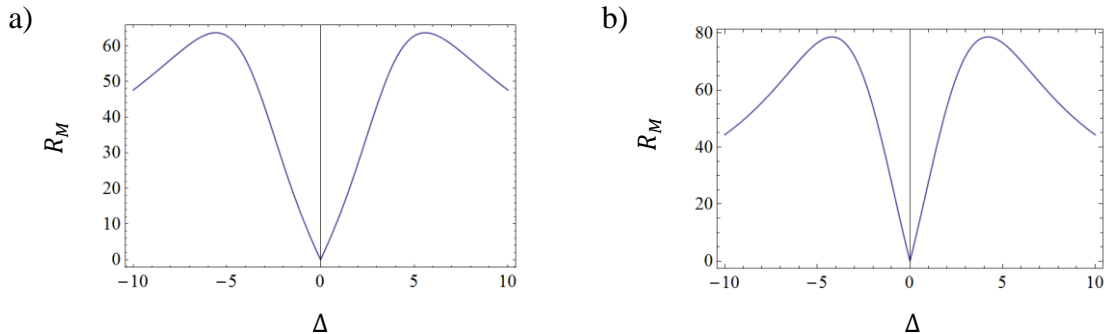


GRÁFICO 10 - Coeficiente de retificação de magnetização em função de Δ :

a) $\delta = 2, \zeta = 2, f = \frac{1}{2}$

b) $\delta = 0, \zeta = 2, f = \frac{1}{2}$

Ainda no GRAF. 10 (a), é possível visualizar um fenômeno geral, válido para qualquer combinação dos parâmetros: a retificação é sempre nula para $\Delta = 0$. Essa configuração introduz uma simetria no sistema. A existência de retificação quanto ao fluxo de magnetização é, conforme anteriormente mencionado, determinada pela não uniformidade do campo magnético externo. No entanto, quando o parâmetro de anisotropia é simetricamente *graded* no sistema – isto é, $(-\delta, \delta)$ –, a retificação quanto a esse fluxo desaparece. O GRAF.

10 (b) mostra R_M para $\delta = 0$, sendo os demais parâmetros iguais aos do GRAF. 10 (a). Nota-se que, no que tange ao fluxo de magnetização, o efeito da inserção de uma assimetria na cadeia é atenuar a retificação introduzida pela assimetria no campo magnético. Esse efeito de atenuação é observado para ζ não muito pequeno, a depender dos demais parâmetros, e pode ser melhor observado no GRAF. 11.

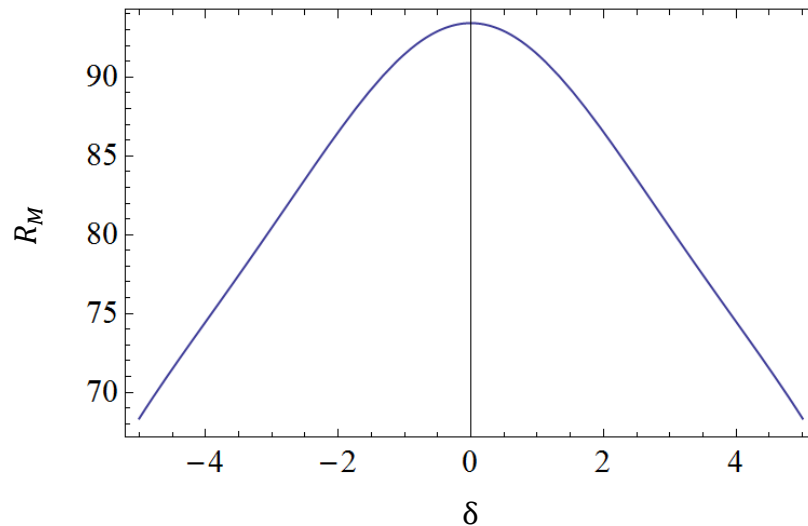


GRÁFICO 11 - Coeficiente de retificação de magnetização em função de δ para $f = \frac{1}{2}$, $\zeta = 4$ e $\Delta = 10$.

Os GRAF. 12 (a) e (b) mostram o fluxo de energia para $\delta = 2$ e $\delta = -2$, respectivamente, e $b = \zeta = 0$. Recupera-se o caso peculiar apresentado no capítulo anterior, da degenerescência introduzida no sistema pela ausência de campo magnético. Analisa-se esse caso particular um pouco mais a fundo aqui.

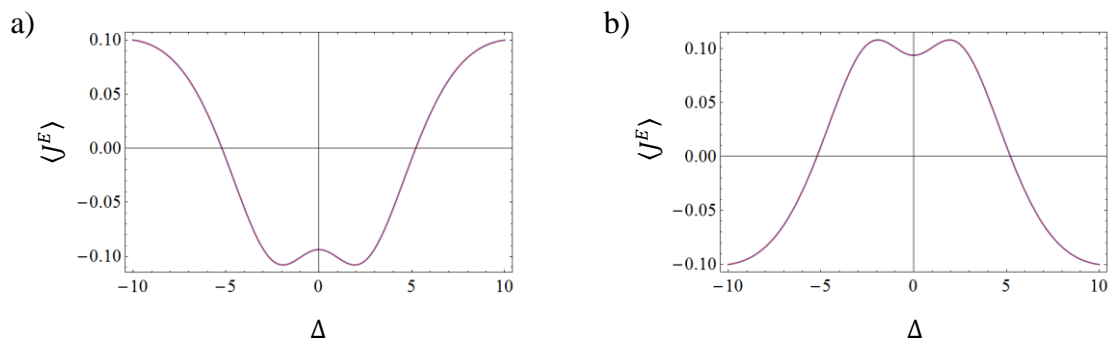


GRÁFICO 12 - Fluxo de energia em função de Δ :

a) $\delta = 2$, $b = \zeta = 0$, $f = \pm 1$

b) $\delta = -2$, $b = \zeta = 0$, $f = \pm 1$

Essas combinações de parâmetros foram escolhidas intencionalmente, pois permitem ver, no mesmo gráfico, que o fluxo de energia corre no sentido de J^z menor para J^z maior para determinados valores de Δ e no sentido contrário para outros. A comparação entre os gráficos permite ver que, ao se inverter a cadeia, trocando-se o sinal de δ , o fluxo para determinado Δ muda de sentido – quer dizer, se antes ia de J^z menor para J^z maior, continua nesse sentido e vice-versa. Essa decorrência é claramente procedente, uma vez que J^z é o único parâmetro que determina o sentido do fluxo. Uma análise completa revela a seguinte divisão:

- a) para $0 < \delta \lesssim \frac{3}{2}$, os fluxos (para cada Δ) são sempre positivos, independentemente de f ;
- b) para $\frac{3}{2} \lesssim \delta \lesssim \frac{5}{2}$, tem-se uma região de transição. Dado f , existem, via de regra, valores de Δ para os quais os fluxos são positivos e valores de Δ para os quais os fluxos são negativos. Quanto maior δ , maior deve ser f para que haja essa divisão – abaixo desse f crítico, os fluxos são negativos para todo Δ . Dados Δ e δ , em geral, os fluxos podem ser feitos positivos ou negativos variando-se o valor de f ;
- c) para $\frac{5}{2} \lesssim \delta < 3$, os fluxos são sempre negativos, independentemente de f .

Considerou-se $0 < \delta < 3$, de modo que se tivesse $\delta < \Delta$ na maior parte do intervalo de Δ nos gráficos. Concentra-se na configuração em que δ flutua em torno de Δ (propósito primeiro da estruturação *graded*), e, portanto, ignora-se de imediato a região em que $\delta > \Delta$. A análise é mais distinta para as situações em que δ é razoavelmente menor que Δ – e pode tornar-se complicada quando os valores desses parâmetros começam a competir. Para $\delta < 0$, a análise acima é análoga. A divisão é a mesma, apenas se invertendo o sinal dos fluxos em cada situação e adequando-se os intervalos de δ simetricamente na região negativa.

Apresentam-se agora as simetrias gerais – ou seja, considerando-se todos os parâmetros não nulos – apresentadas pelo sistema quanto ao fluxo de energia. São elas (as variáveis omitidas são mantidas inalteradas):

$$\blacksquare \langle J^E \rangle(\Delta, \zeta) = \langle J^E \rangle(-\Delta, -\zeta) \quad (3.16)$$

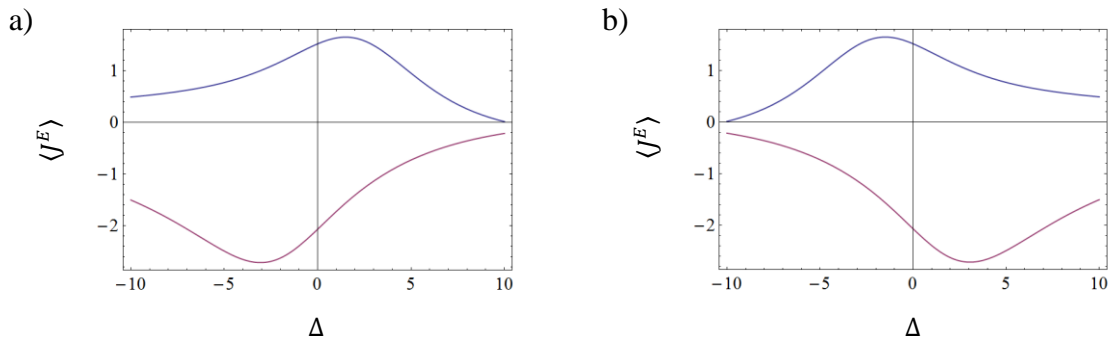


GRÁFICO 13 - Fluxo de energia em função de Δ (em azul – as curvas em roxo seguem para $f \rightarrow -f$):

a) $\zeta = 1, b = 3, \delta = 1, f = 1$

b) $\zeta = -1, b = 3, \delta = 1, f = 1$

Inverter o sinal de ζ equivale a refletir as curvas em relação ao eixo vertical.

$$\blacksquare \langle J^E \rangle(\Delta, \delta, f) = -\langle J^E \rangle(-\Delta, -\delta, -f) \quad (3.17)$$

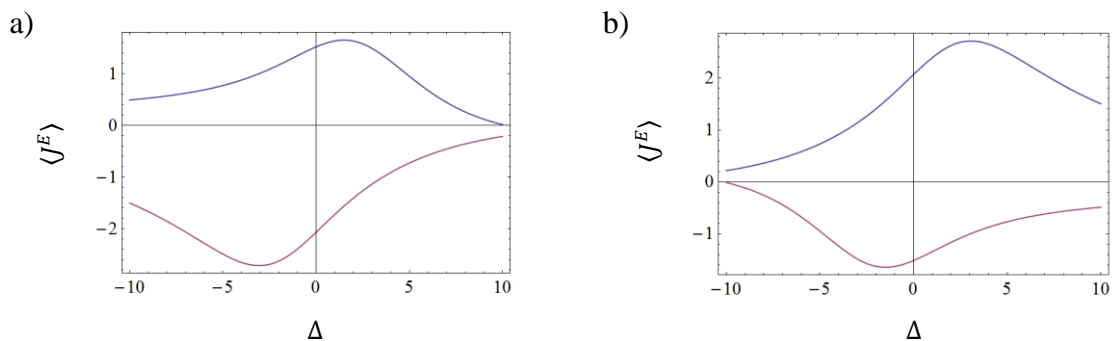


GRÁFICO 14 - Fluxo de energia em função de Δ (em azul – as curvas em roxo seguem para $f \rightarrow -f$):

a) $\delta = 1, b = 3, \zeta = 1, f = 1$

b) $\delta = -1, b = 3, \zeta = 1, f = 1$

As curvas para δ invertido podem ser obtidas a partir das originais por meio de uma reflexão em relação ao eixo horizontal seguida de uma em relação ao eixo vertical e invertendo-se as suas cores (quer dizer, fazendo-se $f \rightarrow -f$).

Os GRAF. 15 (a) e (b) mostram as curvas para as componentes XXZ (em azul) e B (em roxo) do fluxo de energia para os sistemas com a configuração original e com os reservatórios invertidos, respectivamente. A componente XXZ obedece à mesma relação para o fluxo total – isto é: $\langle J^{XXZ} \rangle(\Delta, \delta, f) = -\langle J^{XXZ} \rangle(-\Delta, -\delta, -f)$. A componente B, por sua vez, é par quanto a δ e obedece à relação similar $\langle J^B \rangle(\Delta, f) = -\langle J^B \rangle(-\Delta, -f)$.

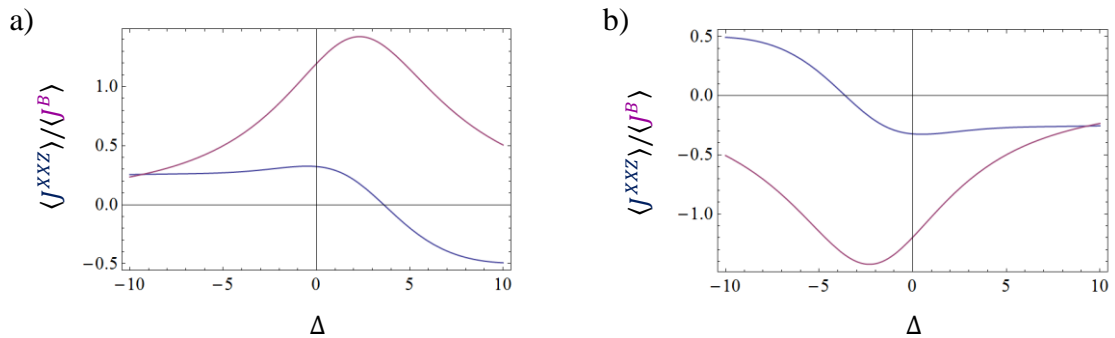


GRÁFICO 15 - Componentes XXZ (em azul) e B (em roxo) do fluxo de energia em função de Δ :

a) $\delta = 1, b = 3, \zeta = 1, f = 1$

b) $\delta = -1, b = 3, \zeta = 1, f = -1$

$$\bullet \quad \langle J^E \rangle(\delta, \zeta, f) = -\langle J^E \rangle(-\delta, -\zeta, -f) \quad (3.18)$$

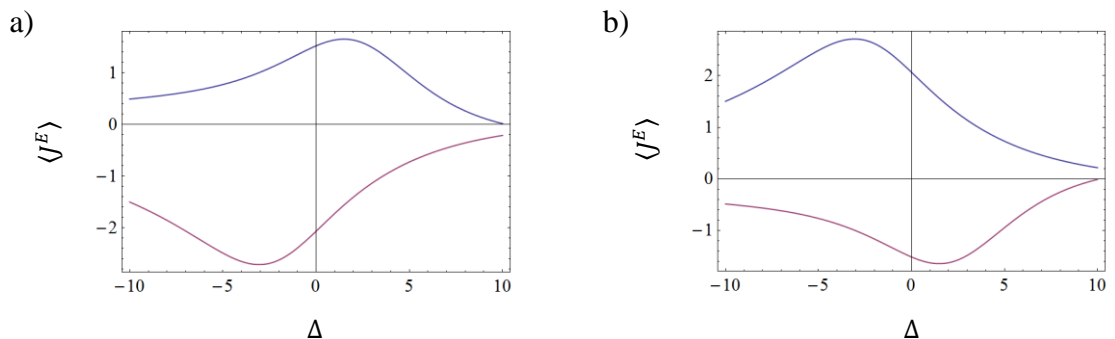


GRÁFICO 16 - Fluxo de energia em função de Δ (em azul – as curvas em roxo seguem para $f \rightarrow -f$):

a) $\delta = 1, \zeta = 1, b = 3, f = 1$

b) $\delta = -1, \zeta = -1, b = 3, f = 1$

Inverter, simultaneamente, δ e ζ equivale a refletir as curvas em relação ao eixo horizontal e inverter suas cores (fazer $f \rightarrow -f$). Essa é uma simetria trivial. Inverter δ , ζ e f gera o mesmo sistema, apenas visto por outro ângulo – girado de 180° em relação ao eixo z , definido pela direção do campo magnético. O fluxo é igual, em módulo, ao do sistema original, mas com sinal oposto. Veja o esquema da FIG. 1 – os quadrados representam os reservatórios, e os círculos, os spins.

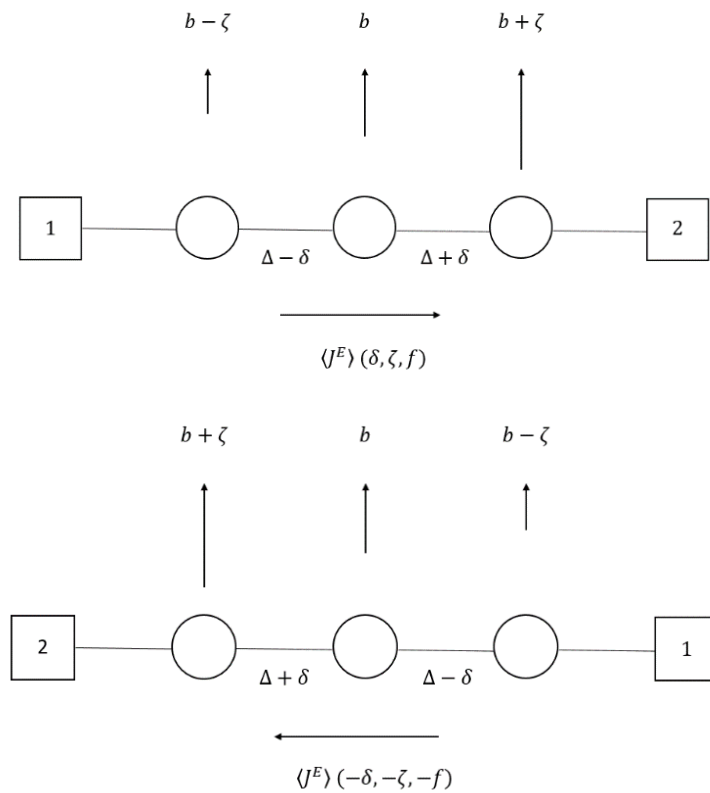


FIGURA 1 - Esquema da cadeia de spin para o sistema original (acima) e para o sistema com δ , ζ e f invertidos (abaixo).

$$\blacksquare \langle J^E \rangle(\Delta, b, f) = \langle J^E \rangle(-\Delta, -b, -f) \quad (3.19)$$

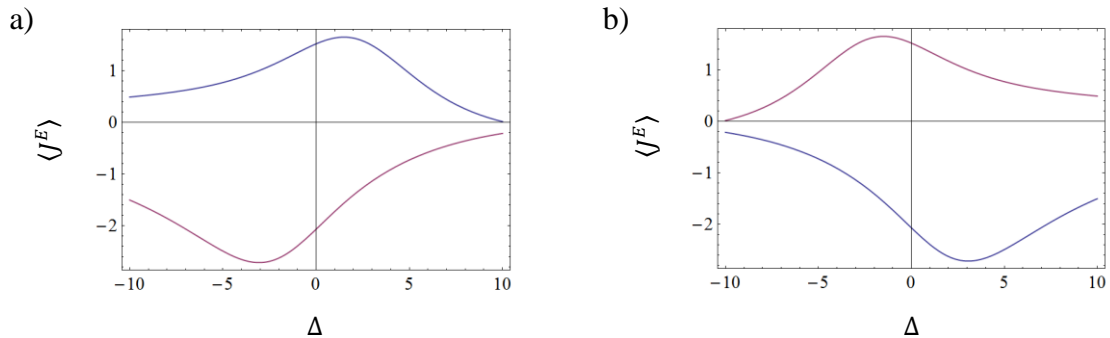


GRÁFICO 17 - Fluxo de energia em função de Δ (em azul – as curvas em roxo seguem para $f \rightarrow -f$):

a) $b = 3, \zeta = 1, \delta = 1, f = 1$

b) $b = -3, \zeta = 1, \delta = 1, f = 1$

Inverter o sinal de b equivale a refletir as curvas em relação ao eixo vertical e inverter suas cores (fazer $f \rightarrow -f$).

$$\blacksquare \langle J^E \rangle(b, \zeta, f) = \langle J^E \rangle(-b, -\zeta, -f) \quad (3.20)$$

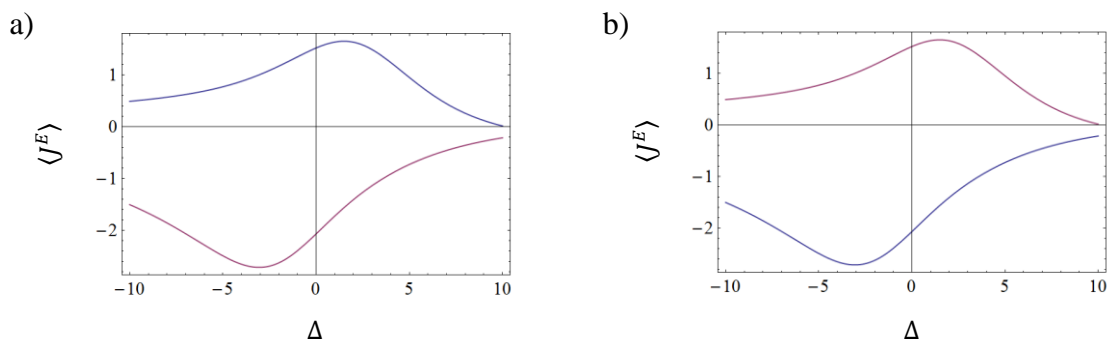


GRÁFICO 18 - Fluxo de energia em função de Δ (em azul – as curvas em roxo seguem para $f \rightarrow -f$):

a) $b = 3, \zeta = 1, \delta = 1, f = 1$

b) $b = -3, \zeta = -1, \delta = 1, f = 1$

Inverter, simultaneamente, b e ζ equivale a inverter as cores das curvas (fazer $f \rightarrow -f$).

O GRAF. 19 mostra as curvas para as componentes XXZ (em azul) e B (em roxo) do fluxo de energia nesse caso particular. As componentes para b, ζ e f invertidos são idênticas às originais – ou seja: $\langle J^{XXZ} \rangle(b, \zeta, f) = \langle J^{XXZ} \rangle(-b, -\zeta, -f)$ e $\langle J^B \rangle(b, \zeta, f) = \langle J^B \rangle(-b, -\zeta, -f)$.

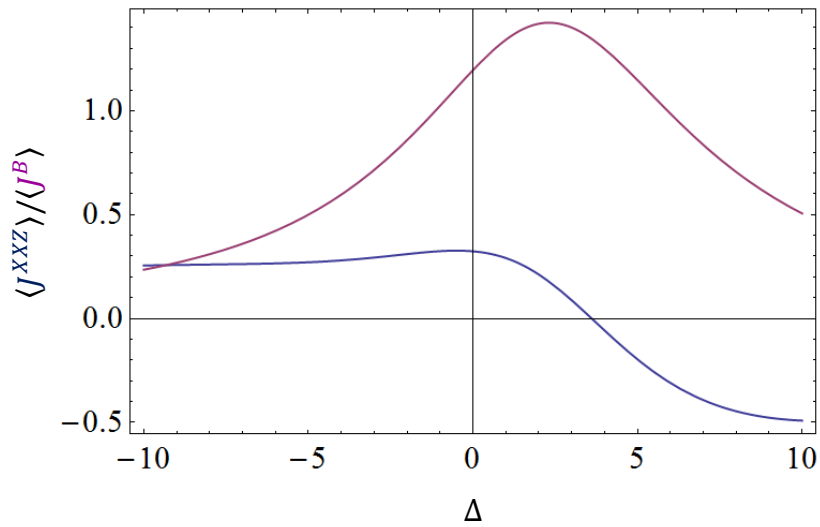


GRÁFICO 19 - Componentes XXZ (em azul) e B (em roxo) do fluxo de energia em função de Δ para as configurações $b = 3$, $\zeta = 1$, $f = 1$ e $b = -3$, $\zeta = -1$, $f = -1$. Aqui, $\delta = 1$.

O GRAF. 20 mostra o fluxo de energia para $b = 0$ e $\zeta \neq 0$. As curvas são simétricas em relação ao eixo vertical, e os fluxos para o sistema original e para aquele com os reservatórios invertidos coincidem em $\Delta = 0$. Essa configuração introduz uma simetria no sistema.

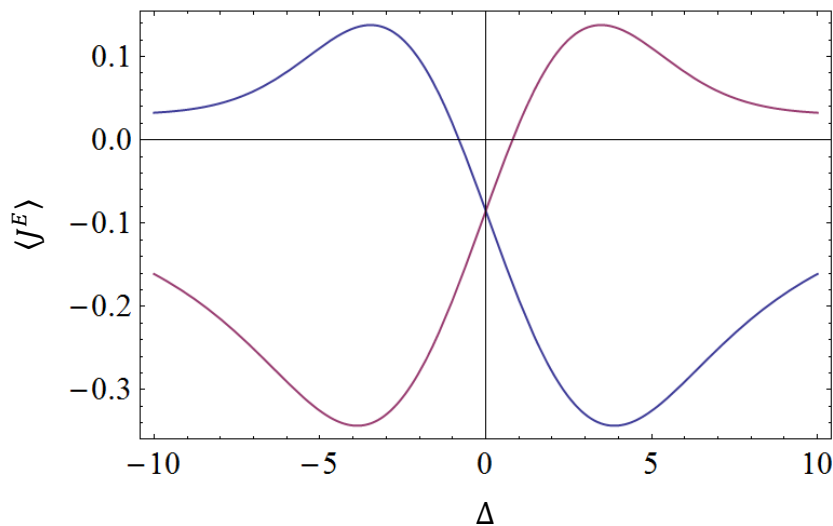


GRÁFICO 20 - Fluxo de energia em função de Δ para $f = \frac{1}{2}$, $b = 0$, $\zeta = 2$ e $\delta = 2$ (em azul). A curva em roxo segue fazendo-se $f \rightarrow -f$.

O GRAF. 21 mostra R_E (introduzido no capítulo anterior) em função de Δ para um caso em que, também, $b = 0$ e $\zeta \neq 0$. Naturalmente, $R_E(\Delta = 0) = 0$.

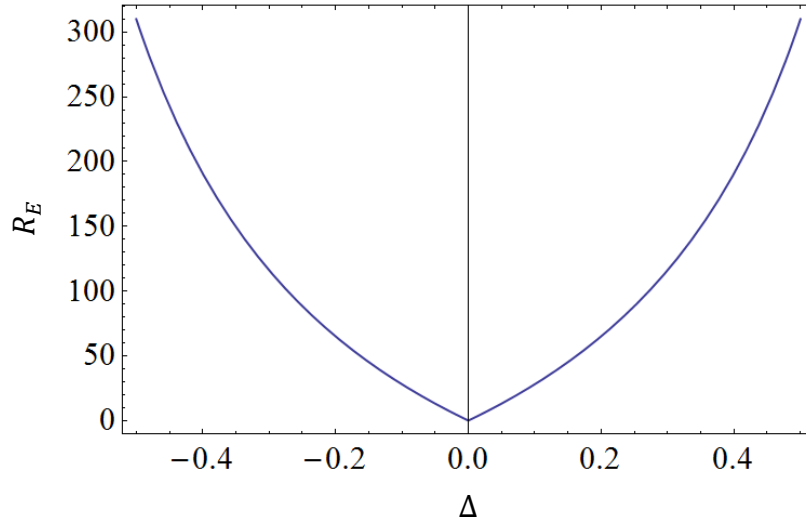


GRÁFICO 21 - Coeficiente de retificação de energia em função de Δ para $f = \frac{1}{2}$,
 $b = 0$, $\zeta = 1$ e $\delta = 2$.

O GRAF. 22 mostra o fluxo de energia para B uniforme ($\zeta = 0$). Os GRAF. 23 (a) e (b) mostram o fluxo para B *graded* ($\zeta \neq 0$), sendo os valores dos outros parâmetros iguais para fins de comparação. Considera-se o regime em que δ é razoavelmente menor que Δ e ζ é razoavelmente menor que b . Para $\zeta = 0$, o fluxo para o sistema com a configuração original (em azul) e o fluxo para o sistema com os reservatórios invertidos (em roxo) são, cada um, simétricos em relação ao eixo vertical. Ao se aumentar ligeiramente ζ (GRAF. 23 (a)), os fluxos tendem a crescer, em módulo, para $\Delta < 0$ e a diminuir, em módulo, para $\Delta > 0$. Essa tendência desaparece ao se continuar aumentando ζ (GRAF. 23 (b)) – permanecendo-se, ainda, no regime em que esse parâmetro é razoavelmente menor que b –, e os fluxos diminuem, em módulo, para todo Δ . Tomam-se, aqui, todos os parâmetros positivos. Os resultados para os parâmetros negativos podem ser deduzidos com base nas simetrias (3.16) a (3.20).

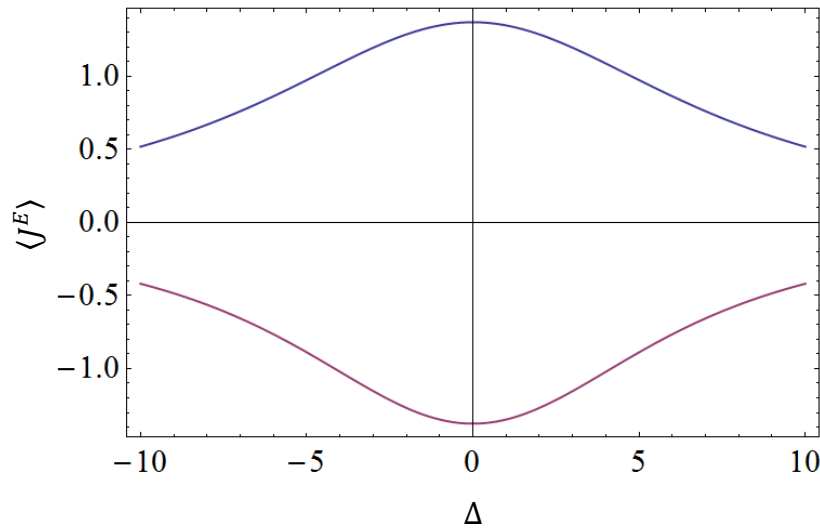


GRÁFICO 22 - Fluxo de energia em função de Δ para $f = \frac{1}{2}$, $b = 3$, $\zeta = 0$ e $\delta = 1$ (em azul). A curva em roxo segue fazendo-se $f \rightarrow -f$.

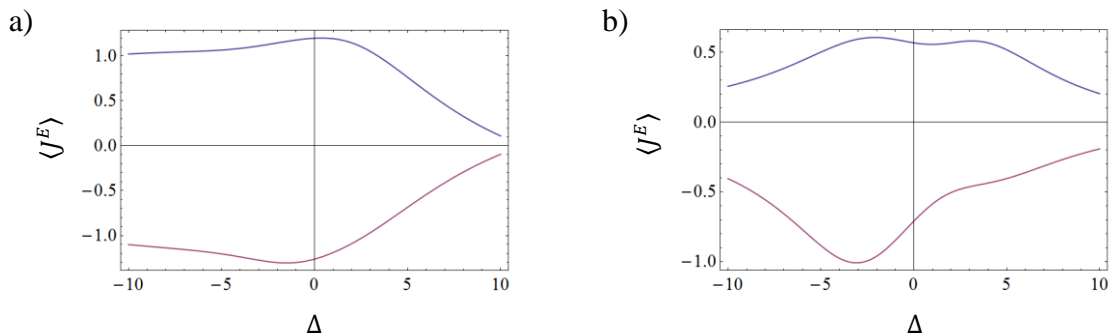


GRÁFICO 23 - Fluxo de energia em função de Δ (em azul – as curvas em roxo seguem para $f \rightarrow -f$):

$$\text{a) } \zeta = \frac{1}{2}, b = 3, \delta = 1, f = \frac{1}{2}$$

$$\text{b) } \zeta = \frac{3}{2}, b = 3, \delta = 1, f = \frac{1}{2}$$

Os GRAF. 24 (a) a (f) mostram uma série de curvas para o coeficiente de retificação de energia para aumento progressivo de ζ . Analisa-se como o campo magnético *graded* altera a retificação já existente devido a Δ *graded* – com o campo magnético uniforme (caso $\zeta = 0$). Concentra-se a análise nos intervalos $-10 \leq \Delta \leq -5$ e $5 \leq \Delta \leq 10$, tais que $\delta \leq 10\% \Delta$, e $0 \leq \zeta \leq \frac{1}{2}$, de forma que $\zeta \leq 10\% b$ ($\delta = \frac{1}{2}$ e $b = 5$). Nota-se a existência de um valor crítico para ζ , tal que, para a maior parte do intervalo, a retificação diminui ao se aumentar ζ até esse valor e passa a aumentar a partir dele. No presente caso, $\zeta_{\text{critico}} \approx 0,4$ (ζ_{critico} depende de δ). A

diminuição e o aumento da retificação, em seus respectivos intervalos, são mais acentuados na região $\Delta < 0$.

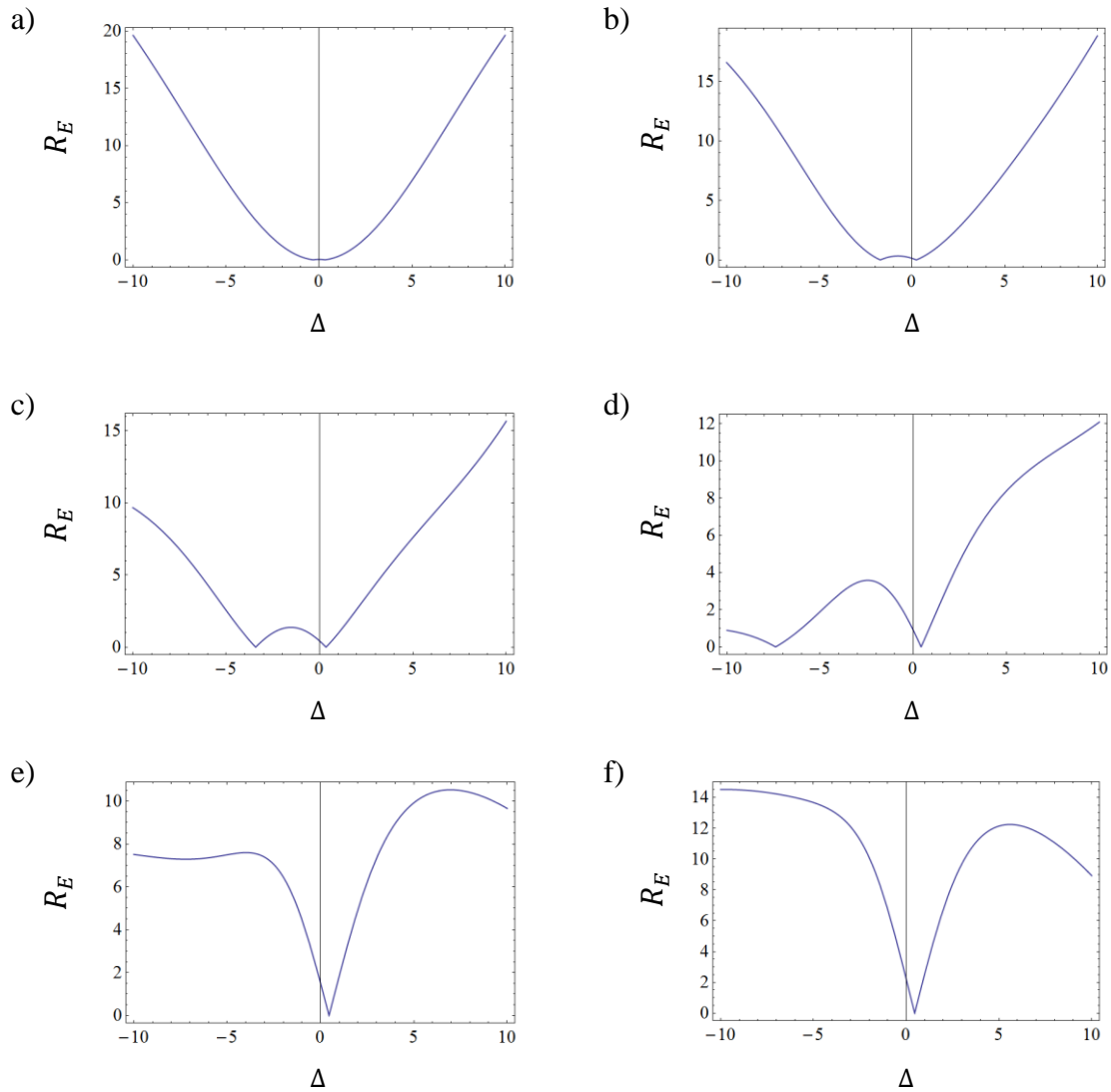


GRÁFICO 24 - Coeficiente de retificação de energia em função de Δ para aumento progressivo de ζ , de

$$\zeta = 0 \text{ a } \zeta = \frac{1}{2}, \text{ em intervalos de } \zeta = \frac{1}{10}. f = \frac{1}{2}, b = 5 \text{ e } \delta = \frac{1}{2}.$$

3.3 Outros resultados

A fim de mostrar que a retificação quanto ao fluxo de energia se manifesta para diferentes tamanhos do sistema, interações e condições de contorno, investigam-se – por meio de análise computacional com o *software* Mathematica[®] – configurações distintas da cadeia de

spin, com dinâmica ainda modelada pela equação de Lindblad (2.2). Apresentam-se os resultados a seguir.

3.3.1 $N \geq 3$

Conforme a seção 1.1.4, para um sistema com N spins, os cálculos computacionais no estado estacionário envolvem matrizes de dimensão 2^{2N} . Esses cálculos tornam-se cada vez mais difíceis, em termos computacionais, à medida que N aumenta. Posto que o objetivo central desta seção consiste em mostrar a permanência da retificação para $N > 3$, procede-se com os cálculos em caráter numérico, e dispõem-se os resultados na TAB. 1. Fazem-se os cálculos para $N = 3$, $N = 4$ e $N = 5$. Considera-se o seguinte Hamiltoniano, com campo magnético uniforme:

$$H = 3 \sum_{i=1}^N \sigma_i^z + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left[\frac{5}{2} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right]$$

Tomam-se $\Delta_{1,2} = 10$, $\Delta_{2,3} = 11$, $\Delta_{3,4} = 12$ e $\Delta_{4,5} = 13$ (obviamente, tem-se apenas $\Delta_{1,2}$ e $\Delta_{2,3}$ para $N = 3$ e $\Delta_{1,2}$, $\Delta_{2,3}$ e $\Delta_{3,4}$ para $N = 4$). Toma-se, ainda, $f = \pm \frac{1}{2}$, $\pm \frac{1}{4}$ e $\pm \frac{1}{8}$.

TABELA 1
Fluxo de energia para $N \geq 3$

..		$\langle J^E \rangle$		
f	N	3	4	5
1/2		0,78124	0,29931	0,10378
-1/2		-0,56939	-0,29131	-0,10806
1/4		0,36476	0,16105	0,05614
-1/4		-0,31741	-0,15883	-0,05706
1/8		0,17674	0,08155	0,02858
-1/8		-0,16522	-0,08098	-0,02880

3.3.2 α graded

Considera-se o seguinte Hamiltoniano:

$$H = \sum_{i=1}^3 B_i \sigma_i^z + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \left[\alpha_{i,i+1} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \frac{5}{2} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right],$$

$$B_1 = b - \zeta$$

$$B_2 = b$$

$$B_3 = b + \zeta$$

$$\alpha_{1,2} = A - \alpha$$

$$\alpha_{2,3} = A + \alpha$$

O GRAF. 25 (a) mostra um caso típico do fluxo de energia (em função de A). Os fluxos são sempre nulos para $A = \pm\alpha$. É clara a existência de retificação, a qual se faz presente mesmo para um campo magnético uniforme ($\zeta = 0$) – ver GRAF. 25 (b).

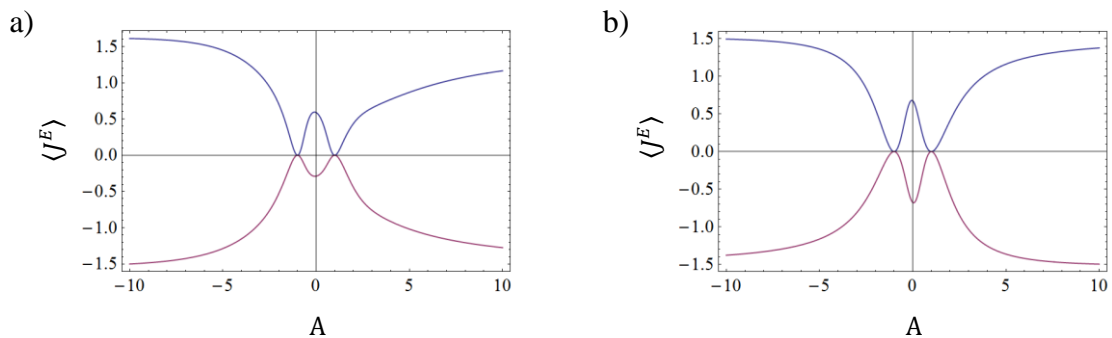


GRÁFICO 25 - Fluxo de energia em função de A (em azul – as curvas em roxo seguem para $f \rightarrow -f$):

a) $\zeta = 1, b = 3, \alpha = 1, f = \frac{1}{2}$

b) $\zeta = 0, b = 3, \alpha = 1, f = \frac{1}{2}$

3.3.3 Modelo XXX totalmente *graded*

Considera-se o seguinte Hamiltoniano:

$$H = \sum_{i=1}^3 B_i \sigma_i^z + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 [\alpha_{i,i+1} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)],$$

$$B_1 = b - \zeta$$

$$B_2 = b$$

$$B_3 = b + \zeta$$

$$\alpha_{1,2} = A - \alpha$$

$$\alpha_{2,3} = A + \alpha$$

O GRAF. 26 (a) mostra um caso típico do fluxo de energia, em que se pode ver a existência de retificação. Os fluxos são sempre nulos para $A = \pm\alpha$. Há retificação, também, para um campo magnético uniforme ($\zeta = 0$) – ver GRAF. 26 (b). Nesse caso, ademais, o módulo de $\langle J^E \rangle$ com B *graded* é menor ou igual ao módulo de $\langle J^E \rangle$ com B uniforme.

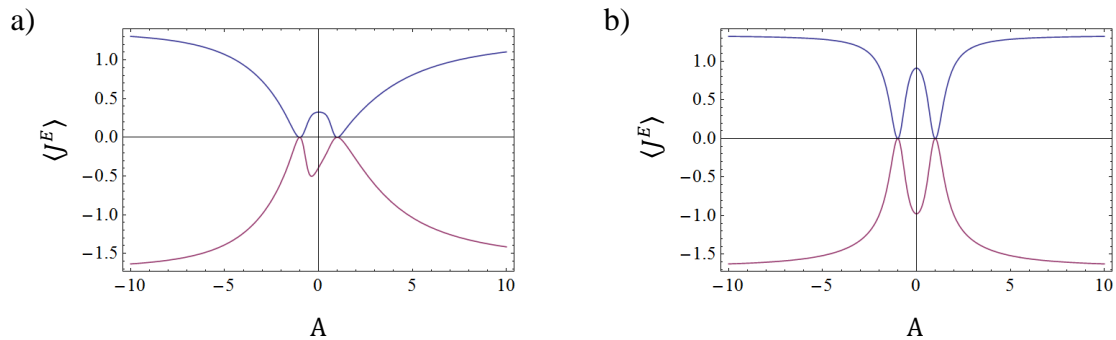


GRÁFICO 26 - Fluxo de energia em função de A (em azul – as curvas em roxo seguem para $f \rightarrow -f$):

a) $\zeta = 1, b = 3, \alpha = 1, f = \frac{1}{2}$

b) $\zeta = 0, b = 3, \alpha = 1, f = \frac{1}{2}$

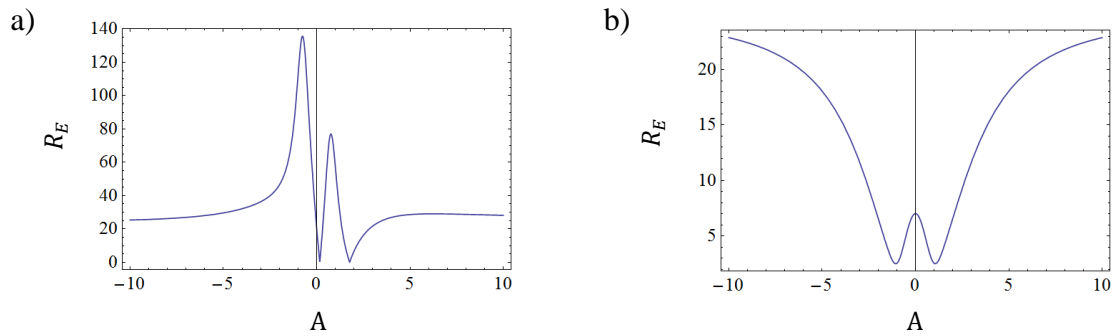


GRÁFICO 27 - Coeficiente de retificação de energia em função de A:

$$\text{a) } \zeta = 1, b = 3, \alpha = 1, f = \frac{1}{2}$$

$$\text{b) } \zeta = 0, b = 3, \alpha = 1, f = \frac{1}{2}$$

Os GRAF. 27 (a) e (b) mostram o coeficiente de retificação de energia para $\zeta = 1$ e $\zeta = 0$, respectivamente. Não se mostra uma série de gráficos para aumento progressivo de ζ , como se fez para o caso Δ *graded*, mas constata-se que a retificação para o sistema na presença de um campo magnético *graded* é sempre maior que aquela na presença de um campo magnético uniforme – considerando-se o regime em que α é razoavelmente menor que A e ζ é razoavelmente menor que b .

O GRAF. 28 mostra o fluxo de energia para $b = \zeta = 0$. Ao contrário do que acontece no modelo XXZ para Δ *graded*, o fluxo, nesse caso, tem um sentido bem definido e independente dos valores atribuídos a α e f , dependendo apenas do sinal de α . Para $\alpha > 0$ ($\alpha < 0$), o fluxo é sempre menor (maior) ou igual a zero e corre, pois, invariavelmente, no sentido de $\alpha_{i,i+1}$ decrescente.

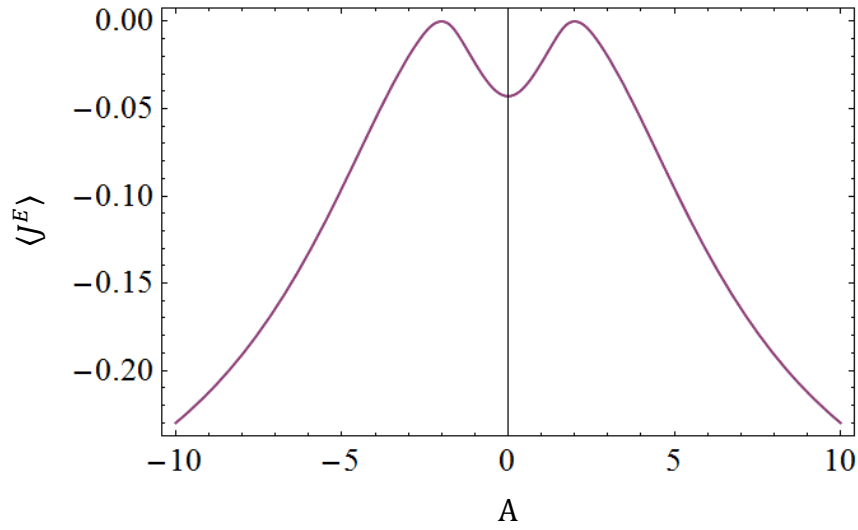


GRÁFICO 28 - Fluxo de energia em função de A para $f = \pm \frac{1}{2}$, $b = \zeta = 0$ e $\alpha = 2$.

3.3.4 Modelo XXZ totalmente *graded*

Considera-se o seguinte Hamiltoniano:

$$H = \sum_{i=1}^3 B_i \sigma_i^z + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 [\alpha_{i,i+1} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z],$$

$$B_1 = b - \zeta$$

$$B_2 = b$$

$$B_3 = b + \zeta$$

$$\alpha_{1,2} = 1 - \delta$$

$$\alpha_{2,3} = 1 + \delta$$

$$\Delta_{1,2} = \Delta - \delta$$

$$\Delta_{2,3} = \Delta + \delta$$

O GRAF. 29 (a) mostra um caso típico do fluxo de energia (em função de Δ), em que se pode ver a existência de retificação. Toma-se $\delta = \frac{1}{2}$ nos gráficos. Os fluxos são nulos para $\delta = \pm 1$.

Respaldo-se nesse caso e nos dois anteriores (α *graded* e modelo XXX totalmente *graded*), apura-se que o fluxo de energia é nulo se $J^x = J^y$ for nulo em alguma ligação ($\alpha_{1,2}$ ou $\alpha_{2,3}$). O mesmo não ocorre para J^z . Há retificação, também, para um campo magnético uniforme ($\zeta = 0$), ao que se pode atentar no GRAF. 29 (b).

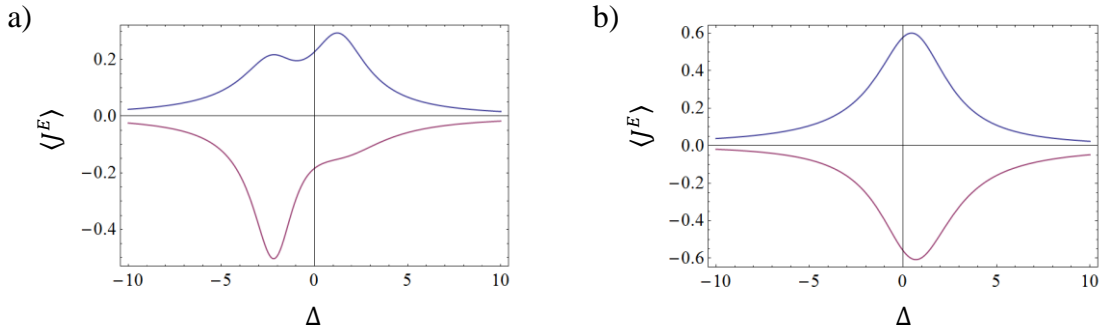


GRÁFICO 29 - Fluxo de energia em função de Δ (em azul – as curvas em roxo seguem para $f \rightarrow -f$):

$$\text{a) } \zeta = 1, b = 3, \delta = \frac{1}{2}, f = \frac{1}{2}$$

$$\text{b) } \zeta = 0, b = 3, \delta = \frac{1}{2}, f = \frac{1}{2}$$

3.3.5 Twisted XY boundary gradients

Reconsidera-se o modelo XXZ com Δ *graded* e campo magnético uniforme, mas com a condição de contorno $\langle \sigma_0^y \rangle = \kappa = \langle \sigma_{N+1}^x \rangle$. Considera-se o seguinte Hamiltoniano:

$$H = 3 \sum_{i=1}^3 \sigma_i^z + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{5}{2} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right\},$$

$$\Delta_{1,2} = 10 - \delta$$

$$\Delta_{2,3} = 10 + \delta$$

O GRAF. 30 mostra um caso típico do fluxo de energia (em função de δ). A existência de retificação é clara.

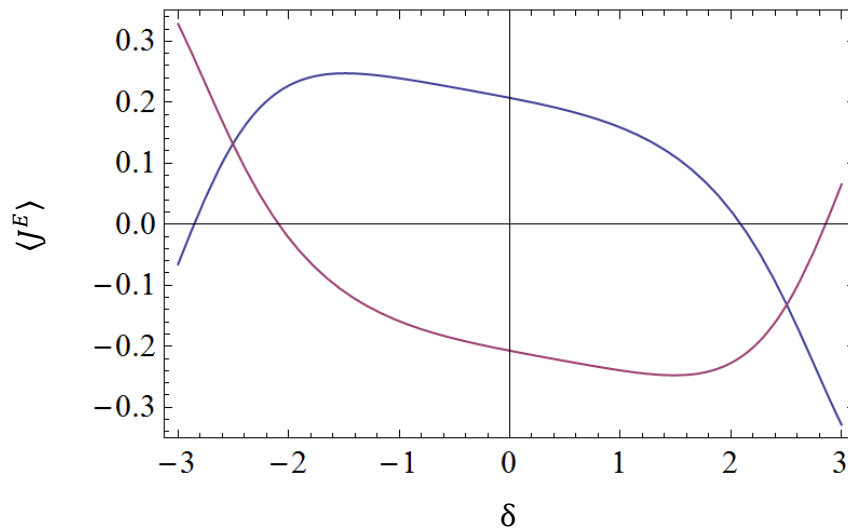


GRÁFICO 30 - Fluxo de energia em função de δ para $\langle \sigma_0^y \rangle = 1 = \kappa = \langle \sigma_{N+1}^x \rangle$ (em azul). A curva em roxo segue para $\langle \sigma_0^x \rangle = 1 = \kappa = \langle \sigma_{N+1}^y \rangle$.

Nesse modelo, excepcionalmente, constata-se a existência de retificação também para o fluxo de magnetização (sendo o campo magnético uniforme). Apesar de não se dar ênfase a esse fluxo nesta seção, em todos os outros modelos, havia retificação para o fluxo de magnetização apenas no caso de um campo magnético *graded*.

4 CONCLUSÃO

Nesta dissertação, estudaram-se os fluxos de energia e magnetização, no estado estacionário, na cadeia de spin XXZ acoplada a um reservatório de spin em cada extremidade e sujeita a um campo magnético externo. Apresentaram-se soluções exatas para os fluxos no caso de uma cadeia pequena, com três sítios. Analisaram-se os efeitos da introdução de uma assimetria *graded* na cadeia, bem como os efeitos de um campo magnético *graded* no sistema. Analisaram-se também configurações distintas da cadeia de spin, a fim de sinalizar a generalidade do fenômeno da retificação.

No capítulo 2, mostrou-se que a introdução de uma estrutura *graded* no parâmetro de anisotropia da cadeia levava à retificação do fluxo de energia. Mostrou-se, ainda, que a ausência de um campo magnético atuando sobre a cadeia com estrutura *graded* introduz uma degenerescência no sistema: inverter os reservatórios, nesse caso, não afeta o fluxo de energia. O fluxo de magnetização não exhibe retificação na presença de um campo magnético uniforme.

No capítulo 3, mostrou-se que um campo magnético não homogêneo (*graded*) atuando sobre a cadeia (uniforme) é suficiente para fazer com que haja retificação relativamente a ambos os fluxos. A introdução de um campo magnético *graded* dá origem, pois, a uma nova retificação – quanto ao fluxo de magnetização. Verificou-se que a inserção, nesse sistema (com campo magnético *graded* e cadeia uniforme), de uma estrutura *graded* na cadeia altera a retificação exibida pelo fluxo de magnetização de forma a atenuá-la no regime de ζ (assimetria no campo magnético) não muito próximo de zero. No que diz respeito ao fluxo de energia, a introdução de um campo magnético *graded* no sistema já com estrutura *graded* na cadeia altera a retificação de maneira não trivial: o aumento ou a diminuição da retificação ocorrem para intervalos específicos dos parâmetros, e não de forma global, mesmo para parâmetros de assimetria consideravelmente pequenos. Por fim, tendo em consideração as demais configurações analisadas, averiguaram-se as mesmas condições para a existência de retificação do fluxo de energia. Quanto ao fluxo de magnetização, manifestou-se uma ressalva: no modelo “*twisted XY boundary gradients*”, constatou-se a existência de retificação também para um campo magnético uniforme.

REFERÊNCIAS

- 1 SALINAS, S. *Introdução à Física Estatística*. 2ª ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2013.
- 2 SKLAR, L. *Philosophy of Physics*. 1ª ed. Nova York: Oxford University Press, 1992.
- 3 OLIVEIRA, C.; WERLANG, T. Ergodic hypothesis in classical statistical mechanics. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 29, n. 2, p. 189-201, jan. 2007.
- 4 LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. *Statistical Physics Part I: Course of Theoretical Physics*. 3ª ed. Pérgamo: Butterworth-Heinemann, 1980. Vol. 5.
- 5 SINGH, N. *How and why does statistical mechanics work*. Navarangpura: 2011. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1103.4003>>.
- 6 SOLHA, R. *Condução de calor em cadeias de osciladores harmônicos com massas alternadas*. 2010. 68 f. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2010.
- 7 BONETTO, F.; LEBOWITZ, J.; REY-BELLET, L. Fourier law: a challenge to theorists. In: FOKAS, A.; GRIGORYAN, A; KIBBLE, T.; ZEGARLINSKI, B. *Mathematical Physics 2000*. Londres: Imperial College Press, 2000. p. 128-150.
- 8 LI, B.; WANG, L.; CASATI, G. Thermal diode: rectification of heat flux. *Physical Review Letters*, v. 93, n. 18, 184301, out. 2004.
- 9 CHANG, C.; OKAWA, D.; MAJUMDAR, A.; ZETTL, A. Solid-State Thermal Rectifier. *Science*, v. 314, 5802, nov. 2006.
- 10 PEREIRA, E. Thermal rectification in quantum graded mass systems. *Physics Letters A*, v. 374, n. 19, p. 1933-1937, abr. 2010.
- 11 BALLENTINE, L. *Quantum Mechanics: A Modern Development*. 2ª ed. Singapura: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2015.
- 12 BREUER, H.; PETRUCCIONE, F. *The theory of open quantum systems*. Nova York: Oxford University Press Inc., 2001.
- 13 LANDI, G.; OLIVEIRA, M., KAREVSKI, D. Flux Rectification in the quantum XXZ chain. *Physical Review E*, v. 90, 042142, out. 2014.
- 14 DUPLANTIER, B.; RIVASSEAU, V. *Quantum Spaces: Poincaré Seminar 2007*. Berlim: Birkhäuser Verlag, 2007.
- 15 LEPRI, S.; LIVI, R.; POLITI, A. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. *Physics Reports*, v. 377, p. 1-80, abr. 2013.

- 16 DHAR, A. Heat transport in low-dimensional systems. *Advances in Physics*, v. 57, p. 457-537, dez. 2008.
- 17 LI, N.; REN, J.; WANG, L.; ZHANG, G.; HÄNGGI, P.; LI, B. Colloquium: Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond. *Reviews of Modern Physics*, v. 84, p. 1045-1066, jul. 2012.
- 18 BANDYOPADHYAY, M.; SEGAL, D. Quantum heat transfer in harmonic chains with self-consistent reservoirs: Exact numerical simulations. *Physical Review E*, v. 84, 011151, jul. 2011.
- 19 PEREIRA, E.; LEMOS, H. Symmetry properties of heat conduction in inhomogeneous materials. *Physical Review E*, v. 78, 031108, set. 2008.
- 20 PEREIRA, E.; LEMOS, H.; ÁVILA, R. Ingredients of thermal rectification: The case of classical and quantum self-consistent harmonic chains of oscillators. *Physical Review E*, v. 84, 061135, dez. 2011.
- 21 BRICMONT, J.; KUPIAINEN, A. Towards a Derivation of Fourier's Law for Coupled Anharmonic Oscillators. *Communications in Mathematical Physics*, v. 274, p. 555-626, set. 2007.
- 22 LEFEVERE, R.; SCHENKEL, A. Normal heat conductivity in a strongly pinned chain of anharmonic oscillators. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2006, L02001, fev. 2006.
- 23 POPKOV, V.; LIVI, R. Manipulating energy and spin currents in non-equilibrium systems of interacting qubits. *New Journal of Physics*, v. 15, 023030, fev. 2013.
- 24 MENDOZA-ARENAS, J.; AL-ASSAM, S.; CLARK, S.; JAKSCH, D. Heat transport in the XXZ spin chain: from ballistic to diffusive regimes and dephasing enhancement. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2013, P07007, jul. 2013.
- 25 POPKOV, V. Alternation of sign of magnetization current in driven XXZ chains with twisted XY boundary gradients. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2012, P12015, dez. 2012.
- 26 PEREIRA, E. Sufficient Conditions for thermal rectification in graded materials. *Physical Review E*, v. 83, 031106, mar. 2011.
- 27 HOOGDALÉM, K.; LOSS, D. Rectification of spin currents in spin chains. *Physical Review B*, v. 84, 024402, jul. 2011.
- 28 PROSEN, T. Open XXZ spin chain: Nonequilibrium steady state and a strict bound on ballistic transport. *Physical Review Letters*, v. 106, 217206, maio 2011.
- 29 EVANS, D. Irreducible quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, v. 54, p. 293-297, out. 1977.

- 30 PROSEN, T. Comments on boundary driven open XXZ chain: asymmetric driving and uniqueness of steady states. *Physica Scripta*, v. 86, 058511, set. 2013.

APÊNDICE A

Neste apêndice, apresenta-se uma derivação da equação de Lindblad (2.2). Por meio do esquema de interações repetidas [13], obtém-se uma versão discreta dessa equação, a qual pode ser derivada tomando-se um limite apropriado.

Inicialmente, adicionam-se dois spins à cadeia, rotulados de 0 e $N + 1$, acoplados aos spins 1 e N , respectivamente. Assume-se, por simplicidade, que o acoplamento tenha $\Delta = 0$ – essa simplificação é providencial. O Hamiltoniano total para o sistema aumentado é:

$$H_T = H + h_0 \sigma_0^z + h_{N+1} \sigma_{N+1}^z + V_0 + V_N,$$

em que H é o Hamiltoniano do sistema original e $V_i = \alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y)$.

Assume-se que, em $t = 0$, o sistema encontra-se desacoplado dos spins 0 e $N + 1$, de forma que o seu operador de estado total possa ser fatorada como um produto (de estados não emaranhados):

$$\rho_T = \rho_L \rho(0) \rho_R, \tag{A.1}$$

em que ρ_L e ρ_R são os operadores de estado dos spins 0 e $N + 1$, respectivamente.

Uma matriz de dimensão 2 tem quatro parâmetros, e pode, então, ser escrita como uma combinação de quatro matrizes linearmente independentes, como I (matriz identidade), σ_x , σ_y e σ_z [11]. Consequentemente, pode-se escrever qualquer operador de estado arbitrário de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ na forma

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})$$

Tem-se que $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \text{Tr}(\rho \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{a}$. Os autovalores de ρ são $\frac{1}{2}(1 + |\mathbf{a}|)$ e $\frac{1}{2}(1 - |\mathbf{a}|)$, sendo $0 \leq |\mathbf{a}| \leq 1$ – um autovalor de um operador de estado não pode ser negativo. O fator $\frac{1}{2}$ é introduzido para que se tenha $\text{Tr}(\rho) = 1$, e os parâmetros de \mathbf{a} devem ser reais para assegurar que $\rho = \rho^\dagger$. No presente caso, adota-se um sistema de referência tal que apenas a componente z de \mathbf{a} seja não nula. Destarte, pode-se escrever:

$$\rho_L = \frac{(1 + f_L)}{2} |z_+\rangle\langle z_+| + \frac{(1 - f_L)}{2} |z_-\rangle\langle z_-|, \tag{A.2}$$

em que $a_z \equiv f_L = \langle \sigma_0^z \rangle$.

Similarmente:

$$\rho_R = \frac{(1 + f_R)}{2} |z_+\rangle\langle z_+| + \frac{(1 - f_R)}{2} |z_-\rangle\langle z_-|, \quad (\text{A.3})$$

em que $f_R = \langle \sigma_{N+1}^z \rangle$.

A evolução temporal do sistema aumentado é descrita pela equação de von Neumann:

$$\frac{\partial \rho_T}{\partial t} = -i[H_T, \rho_T],$$

em que se tomou $\hbar = 1$.

A solução formal dessa equação é dada por:

$$\rho_T(t) = U(t)\rho_T(0)U^\dagger(t),$$

sendo $U(t) = e^{-iH_T t}$ o operador de evolução temporal.

Chega-se agora ao esquema de interações repetidas. Começa-se em $t = 0$ com $\rho_T(0)$ fatorado como em (A.1), e permite-se que o sistema evolua até o instante $t = \tau$, em que:

$$\rho_T(\tau) = U(\tau)(\rho_L\rho(0)\rho_R)U^\dagger(\tau)$$

Então, em $t = \tau$, descartam-se os spins 0 e $N + 1$, tomando-se o traço parcial de $\rho_T(\tau)$ em relação a eles:

$$\rho(\tau) = \text{Tr}^{(L,R)}(\rho_T(\tau))$$

A seguir, tomam-se novos spins de um reservatório, construindo-se:

$$\rho_T(\tau) = \rho_L\rho(\tau)\rho_R,$$

em que ρ_L e ρ_R são, mais uma vez, dados por (A.2) e (A.3), respectivamente.

Repete-se esse processo indefinidamente. Definindo-se $\rho_n \equiv \rho(n\tau)$, esse processo pode ser resumido por meio da seguinte expressão:

$$\rho_{n+1} = \text{Tr}^{(L,R)}(U(\tau)(\rho_L\rho_n\rho_R)U^\dagger(\tau)) \quad (\text{A.4})$$

A equação anterior é uma versão discreta da equação de Lindblad. Pode-se derivar a equação (2.2) tomando-se o limite $\tau \rightarrow 0$. Segundo a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff, se A e B são operadores e x é um parâmetro, tem-se:

$$e^{xA} B e^{-xA} = B + [A, B]x + [A, [A, B]] \frac{x^2}{2} + [A, [A, [A, B]]] \frac{x^3}{6} + \dots$$

Utilizando-se essa fórmula:

$$e^{-iH_T\tau} \rho_T e^{iH_T\tau} = \rho_T - i\tau [H_T, \rho_T] - \frac{\tau^2}{2} [H_T, [H_T, \rho_T]] + \dots$$

Inserindo-se esse resultado na equação (A.4), até segunda ordem em τ :

$$\begin{aligned} \rho_{n+1} &= Tr^{(L,R)}(e^{-iH_T\tau} \rho_T e^{iH_T\tau}) \\ &= Tr^{(L,R)}(\rho_T) - i\tau Tr^{(L,R)}([H_T, \rho_T]) - \frac{\tau^2}{2} Tr^{(L,R)}([H_T, [H_T, \rho_T]]), \end{aligned}$$

em que $\rho_T \equiv \rho_L \rho_n \rho_R$.

Sejam $\{|a_m\rangle\} \in \mathcal{H}^{(L)}$, $\{|b_m\rangle\} \in \mathcal{H}^{(R)}$ e $\{|c_m\rangle\} \in \mathcal{H}^{(N)}$ bases ortonormais em seus respectivos espaços, sendo $\mathcal{H}^{(L)}$, $\mathcal{H}^{(R)}$ e $\mathcal{H}^{(N)}$ os espaços de Hilbert associados aos spins 0, $N + 1$ e à cadeia (que compreende os spins 1 a N), respectivamente. Quanto ao primeiro termo:

$$\begin{aligned} Tr^{(L,R)}(\rho_T) &= Tr^{(L,R)}(\rho_L \rho_n \rho_R) = \sum_{i,j} \langle a_i b_j | \rho_L \rho_n \rho_R | a_i b_j \rangle \\ &= \left(\sum_i \langle a_i | \rho_L | a_i \rangle \right) \rho_n \left(\sum_j \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle \right) = \rho_n, \end{aligned}$$

uma vez que

$$\sum_i \langle a_i | \rho_L | a_i \rangle = Tr^{(L)}(\rho_L) = 1 = Tr^{(R)}(\rho_R) = \sum_j \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle$$

A saber:

$$\begin{aligned} Tr^{(L)}(\rho_L) &= \sum_i \langle a_i | \rho_L | a_i \rangle = \sum_i \langle a_i | Tr^{(N,R)}(\rho_T) | a_i \rangle = \sum_i \langle a_i | \sum_{j,k} \langle b_j c_k | \rho_T | b_j c_k \rangle | a_i \rangle \\ &= \sum_{i,j,k} \langle a_i b_j c_k | \rho_T | a_i b_j c_k \rangle = Tr(\rho_T) = 1 \end{aligned}$$

Prova idêntica é válida para $Tr^{(R)}(\rho_R) = 1$.

Quanto ao traço do segundo termo:

$$\begin{aligned}
Tr^{(L,R)}([H_T, \rho_T]) &= \sum_{i,j} \langle a_i b_j | [H + h_0 \sigma_0^z + h_{N+1} \sigma_{N+1}^z + V_0 + V_N, \rho_L \rho_n \rho_R] | a_i b_j \rangle \\
&= \sum_{i,j} \langle a_i b_j | H \rho_L \rho_n \rho_R - \rho_L \rho_n \rho_R H | a_i b_j \rangle + \sum_{i,j} \langle a_i b_j | h_0 \sigma_0^z \rho_L \rho_n \rho_R - \rho_L \rho_n \rho_R h_0 \sigma_0^z | a_i b_j \rangle \\
&\quad + \sum_{i,j} \langle a_i b_j | h_{N+1} \sigma_{N+1}^z \rho_L \rho_n \rho_R - \rho_L \rho_n \rho_R h_{N+1} \sigma_{N+1}^z | a_i b_j \rangle \\
&\quad + \sum_{i,j} \langle a_i b_j | (V_0 + V_N) \rho_L \rho_n \rho_R - \rho_L \rho_n \rho_R (V_0 + V_N) | a_i b_j \rangle \\
&= \sum_{i,j} [H \langle a_i | \rho_L | a_i \rangle \rho_n \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle - \langle a_i | \rho_L | a_i \rangle \rho_n \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle H] \\
&\quad + h_0 \sum_{i,j} [\langle a_i | \sigma_0^z \rho_L | a_i \rangle \rho_n \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle - \langle a_i | \rho_L \rho_n \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle \sigma_0^z | a_i \rangle] \\
&\quad + h_{N+1} \sum_{i,j} [\langle b_j | \sigma_{N+1}^z \langle a_i | \rho_L | a_i \rangle \rho_n \rho_R | b_j \rangle - \langle a_i | \rho_L | a_i \rangle \rho_n \langle b_j | \rho_R \sigma_{N+1}^z | b_j \rangle] \\
&\quad + \alpha \sum_{i,j} \langle a_i b_j | (\sigma_0^x \sigma_1^x + \sigma_0^y \sigma_1^y) \rho_L \rho_n \rho_R - \rho_L \rho_n \rho_R (\sigma_0^x \sigma_1^x + \sigma_0^y \sigma_1^y) | a_i b_j \rangle \\
&\quad + \alpha \sum_{i,j} \langle a_i b_j | (\sigma_N^x \sigma_{N+1}^x + \sigma_N^y \sigma_{N+1}^y) \rho_L \rho_n \rho_R - \rho_L \rho_n \rho_R (\sigma_N^x \sigma_{N+1}^x + \sigma_N^y \sigma_{N+1}^y) | a_i b_j \rangle \\
&= [H, \rho_n] + h_0 \sum_i \langle a_i | [\sigma_0^z, \rho_L \rho_n] | a_i \rangle + h_{N+1} \sum_j \langle b_j | [\sigma_{N+1}^z, \rho_n \rho_R] | b_j \rangle \\
&\quad + \alpha \sum_i \langle a_i | [\sigma_0^x \sigma_1^x, \rho_L \rho_n] + [\sigma_0^y \sigma_1^y, \rho_L \rho_n] | a_i \rangle \\
&\quad + \alpha \sum_j \langle b_j | [\sigma_N^x \sigma_{N+1}^x, \rho_n \rho_R] + [\sigma_N^y \sigma_{N+1}^y, \rho_n \rho_R] | b_j \rangle \\
&= [H, \rho_n] + h_0 Tr^{(L)}([\sigma_0^z, \rho_L \rho_n]) + h_{N+1} Tr^{(R)}([\sigma_{N+1}^z, \rho_n \rho_R]) \\
&\quad + \alpha Tr^{(L)}([\sigma_0^x \sigma_1^x, \rho_L \rho_n] + [\sigma_0^y \sigma_1^y, \rho_L \rho_n]) + \alpha Tr^{(R)}([\sigma_N^x \sigma_{N+1}^x, \rho_n \rho_R] + [\sigma_N^y \sigma_{N+1}^y, \rho_n \rho_R])
\end{aligned}$$

Como o traço é invariante sob permutações cíclicas, o traço de um comutador – num espaço de dimensão finita – é sempre nulo. Isto posto, todos os termos da expressão anterior, com exceção do primeiro, são iguais a zero. Assim:

$$\text{Tr}^{(L,R)}([H_T, \rho_T]) = [H, \rho_n]$$

Quanto ao traço do terceiro termo:

$$\text{Tr}^{(L,R)}([H_T, [H_T, \rho_T]]) = \text{Tr}^{(L,R)}([V_0, [V_0, \rho_T]]) + \text{Tr}^{(L,R)}([V_N, [V_N, \rho_T]])$$

Pode-se verificar que todos os outros termos são nulos.

A fim de se obter uma contribuição finita para o acoplamento aos spins das extremidades, deve-se permitir que V_i dependa do tempo de interação τ da seguinte maneira:

$$V_i = \sqrt{\frac{\gamma}{\tau}} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y),$$

em que γ é uma nova constante.

Definem-se, então:

$$\text{Tr}^{(L,R)}\left(-\frac{\tau^2}{2} [V_0, [V_0, \rho_T]]\right) \equiv \tau D_L(\rho_n) \quad (\text{A.5})$$

$$\text{Tr}^{(L,R)}\left(-\frac{\tau^2}{2} [V_N, [V_N, \rho_T]]\right) \equiv \tau D_R(\rho_n) \quad (\text{A.6})$$

Utilizando-se os resultados obtidos para os três termos, a equação (A.4) torna-se:

$$\rho_{n+1} = \rho_n - i\tau[H, \rho_n] + \tau(D_L(\rho_n) + D_R(\rho_n))$$

Finalmente, chega-se à equação de Lindblad (2.2).

$$\frac{d\rho}{dt} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\rho_{n+1} - \rho_n}{\tau} = -i[H, \rho] + D_L(\rho) + D_R(\rho)$$

APÊNDICE B

Neste apêndice, deduz-se a forma explícita para o dissipador total – expressão (2.4) – da equação de Lindblad deduzida no APÊNDICE A.

Pela definição da equação (A.5):

$$D_L(\rho) = -\frac{\tau}{2} \text{Tr}^{(L,R)}([V_0, [V_0, \rho_T]])$$

Utilizando-se $\rho_T \equiv \rho_L \rho \rho_R$, $V_i = \sqrt{\gamma/\tau} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y)$ e as definições de $\{a_m\}$, $\{b_m\}$ e $\{c_m\}$ do APÊNDICE A, tem-se:

$$\begin{aligned} \text{Tr}^{(L,R)}([V_0, [V_0, \rho_T]]) &= \text{Tr}^{(L,R)}(V_0^2 \rho_T - 2V_0 \rho_T V_0 + \rho_T V_0^2) \\ &= \frac{\gamma}{\tau} \text{Tr}^{(L,R)}[(\sigma_0^x \sigma_1^x + \sigma_0^y \sigma_1^y)(\sigma_0^x \sigma_1^x + \sigma_0^y \sigma_1^y) \rho_L \rho \rho_R \\ &\quad - 2(\sigma_0^x \sigma_1^x + \sigma_0^y \sigma_1^y) \rho_L \rho \rho_R (\sigma_0^x \sigma_1^x + \sigma_0^y \sigma_1^y) \\ &\quad + \rho_L \rho \rho_R (\sigma_0^x \sigma_1^x + \sigma_0^y \sigma_1^y)(\sigma_0^x \sigma_1^x + \sigma_0^y \sigma_1^y)] \\ &= \frac{\gamma}{\tau} \text{Tr}^{(L,R)} \left[\sigma_0^{x2} \rho_L \sigma_1^{x2} \rho \rho_R + \sigma_0^x \sigma_0^y \rho_L \sigma_1^x \sigma_1^y \rho \rho_R + \sigma_0^y \sigma_0^x \rho_L \sigma_1^y \sigma_1^x \rho \rho_R + \sigma_0^{y2} \rho_L \sigma_1^{y2} \rho \rho_R \right. \\ &\quad - 2(\sigma_0^x \rho_L \sigma_0^x \sigma_1^x \rho \sigma_1^x \rho_R + \sigma_0^x \rho_L \sigma_0^y \sigma_1^x \rho \sigma_1^y \rho_R + \sigma_0^y \rho_L \sigma_0^x \sigma_1^y \rho \sigma_1^x \rho_R \\ &\quad + \sigma_0^y \rho_L \sigma_0^y \sigma_1^y \rho \sigma_1^y \rho_R) + \rho_L \sigma_0^{x2} \rho \sigma_1^{x2} \rho_R + \rho_L \sigma_0^x \sigma_0^y \rho \sigma_1^x \sigma_1^y \rho_R \\ &\quad \left. + \rho_L \sigma_0^y \sigma_0^x \rho \sigma_1^y \sigma_1^x \rho_R + \rho_L \sigma_0^{y2} \rho \sigma_1^{y2} \rho_R \right] \\ &= \frac{\gamma}{\tau} \sum_{i,j} \left[\langle a_i | \sigma_0^{x2} \rho_L | a_i \rangle \sigma_1^{x2} \rho \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle + \langle a_i | \sigma_0^x \sigma_0^y \rho_L | a_i \rangle \sigma_1^x \sigma_1^y \rho \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle \right. \\ &\quad + \langle a_i | \sigma_0^y \sigma_0^x \rho_L | a_i \rangle \sigma_1^y \sigma_1^x \rho \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle + \langle a_i | \sigma_0^{y2} \rho_L | a_i \rangle \sigma_1^{y2} \rho \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle \\ &\quad - 2(\langle a_i | \sigma_0^x \rho_L \sigma_0^x | a_i \rangle \sigma_1^x \rho \sigma_1^x \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle + \langle a_i | \sigma_0^x \rho_L \sigma_0^y | a_i \rangle \sigma_1^x \rho \sigma_1^y \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle \\ &\quad + \langle a_i | \sigma_0^y \rho_L \sigma_0^x | a_i \rangle \sigma_1^y \rho \sigma_1^x \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle + \langle a_i | \sigma_0^y \rho_L \sigma_0^y | a_i \rangle \sigma_1^y \rho \sigma_1^y \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle) \\ &\quad + \langle a_i | \rho_L \sigma_0^{x2} | a_i \rangle \rho \sigma_1^{x2} \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle + \langle a_i | \rho_L \sigma_0^x \sigma_0^y | a_i \rangle \rho \sigma_1^x \sigma_1^y \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle \\ &\quad \left. + \langle a_i | \rho_L \sigma_0^y \sigma_0^x | a_i \rangle \rho \sigma_1^y \sigma_1^x \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle + \langle a_i | \rho_L \sigma_0^{y2} | a_i \rangle \rho \sigma_1^{y2} \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle \right] \end{aligned}$$

Utilizando-se a propriedade de invariância do traço sob permutações cíclicas, as propriedades satisfeitas pelos operadores de spin de Pauli (ver cap. 2) e o resultado $\sum_j \langle b_j | \rho_R | b_j \rangle = \text{Tr}^{(R)}(\rho_R) = 1$:

$$\begin{aligned}
& \text{Tr}^{(L,R)}([V_0, [V_0, \rho_T]]) \\
&= \frac{\gamma}{\tau} \left\{ \text{Tr}^{(L)}(\sigma_0^{x^2} \rho_L) [\sigma_1^{x^2} \rho + \rho \sigma_1^{x^2} - 2\sigma_1^x \rho \sigma_1^x] \right. \\
&\quad + \text{Tr}^{(L)}(\sigma_0^x \sigma_0^y \rho_L) [\sigma_1^x \sigma_1^y \rho + \rho \sigma_1^x \sigma_1^y - 2\sigma_1^y \rho \sigma_1^x] \\
&\quad + \text{Tr}^{(L)}(\sigma_0^y \sigma_0^x \rho_L) [\sigma_1^y \sigma_1^x \rho + \rho \sigma_1^y \sigma_1^x - 2\sigma_1^x \rho \sigma_1^y] \\
&\quad \left. + \text{Tr}^{(L)}(\sigma_0^{y^2} \rho_L) [\sigma_1^{y^2} \rho + \rho \sigma_1^{y^2} - 2\sigma_1^y \rho \sigma_1^y] \right\} \\
&= \frac{\gamma}{\tau} \left\{ \text{Tr}^{(L)}(\rho_L) [2\rho - 2\sigma_1^x \rho \sigma_1^x] \right. \\
&\quad + \text{Tr}^{(L)}(\sigma_0^x \sigma_0^y \rho_L) [2\sigma_1^x \sigma_1^y \rho + 2\rho \sigma_1^x \sigma_1^y - 2\sigma_1^y \rho \sigma_1^x + 2\sigma_1^x \rho \sigma_1^y] \\
&\quad \left. + \text{Tr}^{(L)}(\rho_L) [2\rho - 2\sigma_1^y \rho \sigma_1^y] \right\} \\
&= \frac{\gamma}{\tau} \left\{ 4\rho - 2\sigma_1^x \rho \sigma_1^x - 2\sigma_1^y \rho \sigma_1^y + 2i \text{Tr}^{(L)}(\sigma_0^z \rho_L) [\sigma_1^x \sigma_1^y \rho + \rho \sigma_1^x \sigma_1^y - \sigma_1^y \rho \sigma_1^x + \sigma_1^x \rho \sigma_1^y] \right\}
\end{aligned}$$

Utilizando-se a equação (A.2):

$$\begin{aligned}
\text{Tr}^{(L)}(\sigma_0^z \rho_L) &= \text{Tr}^{(L)} \left\{ \sigma_0^z \left[\frac{(1+f_L)}{2} |z_+\rangle\langle z_+| + \frac{(1-f_L)}{2} |z_-\rangle\langle z_-| \right] \right\} \\
&= \langle z_+ | \sigma_0^z \left[\frac{(1+f_L)}{2} |z_+\rangle\langle z_+| + \frac{(1-f_L)}{2} |z_-\rangle\langle z_-| \right] |z_+\rangle \\
&\quad + \langle z_- | \sigma_0^z \left[\frac{(1+f_L)}{2} |z_+\rangle\langle z_+| + \frac{(1-f_L)}{2} |z_-\rangle\langle z_-| \right] |z_-\rangle
\end{aligned}$$

De $S_z |s, m\rangle = m |s, m\rangle$, em que $s = \frac{1}{2}$ e $m = \pm \frac{1}{2}$, e $\mathbf{S} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}$ (para $\hbar = 1$), tem-se que $\sigma_0^z |z_\pm\rangle = \pm |z_\pm\rangle$. Daí:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}^{(L)}(\sigma_0^z \rho_L) &= \langle z_+ | \left[\frac{(1+f_L)}{2} |z_+\rangle\langle z_+| + \frac{(1-f_L)}{2} |z_-\rangle\langle z_-| \right] |z_+\rangle \\
&\quad - \langle z_- | \left[\frac{(1+f_L)}{2} |z_+\rangle\langle z_+| + \frac{(1-f_L)}{2} |z_-\rangle\langle z_-| \right] |z_-\rangle \\
&= \frac{(1+f_L)}{2} - \frac{(1-f_L)}{2} = f_L
\end{aligned}$$

Substituindo-se esse resultado na expressão para $Tr^{(L,R)}([V_0, [V_0, \rho_T]])$:

$$\begin{aligned} Tr^{(L,R)}([V_0, [V_0, \rho_T]]) &= \frac{\gamma}{\tau} [4\rho - 2\sigma_1^x \rho \sigma_1^x - 2\sigma_1^y \rho \sigma_1^y \\ &\quad + 2if_L(\sigma_1^x \sigma_1^y \rho + \rho \sigma_1^x \sigma_1^y - \sigma_1^y \rho \sigma_1^x + \sigma_1^x \rho \sigma_1^y)] \end{aligned}$$

Portanto:

$$D_L(\rho) = \gamma[-2\rho + \sigma_1^x \rho \sigma_1^x + \sigma_1^y \rho \sigma_1^y - if_L(\sigma_1^x \sigma_1^y \rho + \rho \sigma_1^x \sigma_1^y - \sigma_1^y \rho \sigma_1^x + \sigma_1^x \rho \sigma_1^y)]$$

Introduzindo-se os operadores $\sigma^\pm \equiv \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y)$ e rearranjando-se os termos:

$$\begin{aligned} D_L(\rho) &= \gamma\{(1 + f_L)[2\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - (\sigma_1^- \sigma_1^+ \rho + \rho \sigma_1^- \sigma_1^+)] \\ &\quad + (1 - f_L)[2\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - (\sigma_1^+ \sigma_1^- \rho + \rho \sigma_1^+ \sigma_1^-)]\} \end{aligned}$$

O cálculo de $D_R(\rho)$ é inteiramente análogo, fazendo-se as correspondências $f_L \rightarrow f_R$ e $\sigma_1^\pm \rightarrow \sigma_N^\pm$. O resultado é:

$$\begin{aligned} D_R(\rho) &= \gamma\{(1 + f_R)[2\sigma_N^+ \rho \sigma_N^- - (\sigma_N^- \sigma_N^+ \rho + \rho \sigma_N^- \sigma_N^+)] \\ &\quad + (1 - f_R)[2\sigma_N^- \rho \sigma_N^+ - (\sigma_N^+ \sigma_N^- \rho + \rho \sigma_N^+ \sigma_N^-)]\} \end{aligned}$$

Por fim:

$$\begin{aligned} D(\rho) &= D_L(\rho) + D_R(\rho) \\ &= \gamma\{(1 + f_L)[2\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - (\sigma_1^- \sigma_1^+ \rho + \rho \sigma_1^- \sigma_1^+)] \\ &\quad + (1 - f_L)[2\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - (\sigma_1^+ \sigma_1^- \rho + \rho \sigma_1^+ \sigma_1^-)] \\ &\quad + (1 + f_R)[2\sigma_N^+ \rho \sigma_N^- - (\sigma_N^- \sigma_N^+ \rho + \rho \sigma_N^- \sigma_N^+)] \\ &\quad + (1 - f_R)[2\sigma_N^- \rho \sigma_N^+ - (\sigma_N^+ \sigma_N^- \rho + \rho \sigma_N^+ \sigma_N^-)]\} \end{aligned}$$

Fazendo-se a alteração de escala $\gamma \rightarrow \frac{\gamma}{4}$, chega-se à expressão (2.4).