

Alberto Luiz de Paula Júnior

**Cadeias de spin fora do equilíbrio: efeito cone de luz e
retificação de correntes de spin e energia**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Física.

Orientadora: Maria Carolina de Oliveira Aguiar

Coorientador: Raphael Campos Drumond

Belo Horizonte

2019

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

Paula Júnior, Alberto Luiz de.

P324c Cadeias de spin fora do equilíbrio: efeito cone de luz e retificação da corrente de spin e energia / Alberto Luiz de Paula Júnior. – 2019. 140 f. il.

Orientador: Maria Carolina de Oliveira Aguiar.
Coorientador: Raphael Campos Drumond.
Tese (doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais – Departamento de Física.
Bibliografia: f. 97 -107.

1. Dinâmica de spins. 2. Cadeias de spins. 3. Sistemas em não-equilíbrio. I. Título. II. Aguiar, Maria Carolina de Oliveira. III. Drumond, Raphael Campos.

CDU –530.145 (043)

Elaborada pela Biblioteca Professor Manoel Lopes de Siqueira da UFMG.

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer aos meus pais e ao meu irmão por todo incentivo e apoio ao longos desses 12 anos fora de casa estudando física. Sempre estiveram ao meu lado e nunca mediram esforços para me ajudar.

Agradeço a Carol pelas conversas, sugestões, pelos devidos puxões de orelha e por ter me ajudado tanto nessa reta final. Foi muito bom ser orientado e ter trabalhado com você. Agradeço também ao Raphael (Dute, Duty ou Dutty, ainda não sei se é mais difícil escrever seu apelido ou sobrenome) por ter me recebido no início do doutorado e ter me apresentado à Carol, pelas nossas conversas que quase sempre resultavam no seu famoso “vamos fumar um cigarro?”. Era nessa hora que muita ideia surgia. Não poderia deixar de agradecer o professor Emmanuael, pela colaboração no terceiro trabalho de doutorado, por sempre estar disponível para tirar minhas dúvidas e, é claro, pelas nossas reuniões super divertidas. Posso dizer que comecei o doutorado quase sem orientador e acabei terminando com três.

Agradeço ao Dudu e ao Gabriel Landi por terem me emprestados os códigos e mesmo de longe estarem disponíveis para tirar dúvidas. Ao Rodrigo Pereira por sempre arrumar um tempo para responder minhas dúvidas e pela colaboração no nosso primeiro trabalho, você foi fundamental. Agradeço também a Helena pela imensa ajuda no meu doutorado, principalmente no primeiro trabalho, muitas vezes parava de fazer o que estava fazendo para me ajudar, foi quase uma coorientação. Ao Flávio e Nathan (chefe do lab) pela convivência e pelas risadas.

Agradeço ao Pumbinha, Gustavo e Dalso pelos estudos, cervejas, churrascos, risadas, futebol, filmes, séries e pelas conversas sobre a física, a vida, o universo e tudo mais. Vocês foram minha segunda família. Ao Erik por ser meu discípulo, se não fosse por mim você não teria passado em Quântica II. E ao povo de Viçosa que também veio para BH, em especial o Filó.

Ao povo da salinha Davi, Marcelo, Mário, Mari, Ana Paula, Arthur e todos os que passaram por lá para fazer uma conta no quadro ou bater um papo enquanto toma um café. Um agradecimento especial à Natália e a Sheilinha, minhas colaboradoras (ou eu que sou colaborador de vocês?), pela paciência com relação a minha enrolação (eu juro que vou ler o artigo nesse fim de semana). Foi muito bom trabalhar e conviver com vocês, espero que a gente colabore ainda mais.

Agradeço a Elen, minha companheira, por estar ao meu lado me apoiando, aguentado todo meu estresse nesse reta final e por me incentivar com essas lindas palavras: “vai fazer sua tese!”, “termine sua tese antes que sua filha nasça!”, “tem problema não, se você

não terminar seu doutorado, vai escrever a tese cuidando da menina!”. Foi de fato muito motivador. Agradeço ao Beethoven, nosso Labrador, que ficou todos os dias da minha escrita debaixo da mesa me acompanhando, meu fiel escudeiro. E, é claro, a minha filha, minha mais nova alegria, que está por vir. Ao Duardinho, Carioca e a turma da panela pela convivência e pelas risadas.

Agradeço a todos os professores e funcionários do departamento de Física da UFMG e a todos os amigos que aqui esqueci de mencionar.

Por fim, agradeço a CAPES, FAPEMIG e CNPq pelo apoio financeiro que foi fundamental para a realização do meu doutorado e minha morada em Belo Horizonte.

Resumo

O foco desta tese é investigar situações de não-equilíbrio geradas em uma cadeia de spin- $1/2$, tratando-a como um sistema quântico fechado e como um sistema quântico aberto. No primeiro caso, tal situação pode ser gerada através de um *quench* (mudança abrupta do hamiltoniano); já, no segundo caso, podemos conectar reservatórios magnéticos desbalanceados nas extremidades da cadeia. Apresentamos aqui dois trabalhos dentro do primeiro caso e um dentro do segundo. Para descrever a dinâmica utilizamos a extensão temporal da técnica numérica *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG).

No primeiro trabalho, investigamos a dinâmica de não-equilíbrio gerada por um *quench* local em uma cadeia de spins descrita pelo modelo XXZ de Heisenberg. Mais especificamente, conectamos duas cadeias, uma preparada em uma fase com ordenamento ferromagnético e a outra em uma fase sem ordenamento magnético. Vimos que, após o *quench*, há o aparecimento de um cone de luz efetivo na magnetização por sítio e na entropia de emaranhamento quando essas quantidades são calculadas na cadeia que está inicialmente sem ordenamento magnético. Mostramos que esses cones de luz estão associados a dois tipos de excitações, spinons e estados ligados, presentes no modelo. Vimos também que, para tempos longos, o estado da cadeia se aproxima do estado de equilíbrio do sistema.

No segundo trabalho, analisamos uma propriedade de blindagem que surge no modelo de Ising com campo transverso. Mostramos que se um sítio $i = L$ da cadeia tem campo nulo e o estado global da cadeia é o estado de Gibbs, o estado reduzido da cadeia à direita do sítio $i = L$ independe dos parâmetros da cadeia da esquerda. Para este efeito demos o nome de propriedade de blindagem. Estudamos também a dinâmica nesta cadeia gerada por um *quench* local aplicado no primeiro sítio. Vimos que há o aparecimento de um cone de luz efetivo no mapa da magnetização por sítio, sendo que o pulso de magnetização é refletido pelo sítio com campo nulo.

No terceiro trabalho, conectamos a cadeia XXZ a dois reservatórios magnéticos em suas extremidades e investigamos as correntes de spin e energia no estado estacionário de não-equilíbrio (NESS). Estávamos interessados em saber se é possível controlar e manipular tais correntes, bem como suas respectivas retificações, por meio de um campo magnético externo. Para isso introduzimos uma assimetria graded (variação gradual dos parâmetros) no campo e no parâmetro de anisotropia do modelo. Vimos que é possível, com uma escolha apropriada de campo, fazer a corrente de energia se propagar no sentido contrário ao da corrente de spin. Conseguimos então inverter não somente as correntes, mas também suas retificações, via mecanismos externos.

Palavras-chave: Cadeias quânticas de spin, não-equilíbrio, sistemas quânticos abertos, retificação.

Abstract

The focus of this thesis is to investigate non equilibrium properties of a spin- $1/2$ chain considered as a closed or an open quantum system. In the first case, the non equilibrium situation is generated by means of a quench (sudden change of the hamiltonian); in the second case, we connect unbalanced magnetic reservoirs at the chain edges. In this thesis, we present two works in the context of closed systems and another one in the case of open systems. To describe the dynamics we use the time-dependent extension of Density Matrix Renormalization Group (DMRG) technique.

In the first work, we investigate the non equilibrium dynamics generated by a local quench in a spin system described by the XXZ Heisenberg model. More specifically, the quench involves connecting two chains, one that is prepared in the ferromagnetic phase and another that is in the paramagnetic phase. After the quench, we observe effective light cones in the maps of the on-site magnetization and the entanglement entropy as a function of site and time, when these quantities are calculated in the chain that had no magnetic order. We show that these light cones are associated with two kinds of excitation characteristic of the XXZ model, more specifically spinons and bound states. Furthermore, we see that, for long times, the system approaches the equilibrium state of the connected chains. system will go to the equilibrium state at infinity time.

In the second work, we analyze shielding properties that appear in the transverse Ising model. If the site $i=L$ of the chain has null field and the global state is a Gibbs state, the reduced state of the chain in the right side of the $i=L$ site is shown to have no dependence on the parameters of the left chain. We refer to this effect as a shielding property. We also study the chain dynamics after a local quench that changes the magnetic field in the first site. We observe a light cone in the on-site magnetization, however the magnetization pulse is reflected by the site with null field.

Finally, in the third work, we connect two magnetic reservoirs at the ends of the XXZ Heisenberg spin chain and calculate the spin and energy currents in the non equilibrium steady state (NESS). We investigate if it is possible to control and manipulate such currents and their respective rectifications by the application of an external magnetic field. For that, we introduce a graded asymmetry (gradual change of the parameters) in the field and in the anisotropy parameter of the model. For appropriate choice of the field, we observe that it is possible to force the energy and the spin currents to propagate in opposite directions. This means that we invert not only the currents but also their rectifications through external mechanisms.

Keywords: Quantum spin chain, non equilibrium, open quantum systems, rectification.

Sumário

	Introdução	1
	Parte I: Cadeia de spin como sistema quântico fechado	7
1	QUENCHES QUÂNTICOS E CADEIA XXZ	9
1.1	Experimentos com redes óticas	9
1.2	Dinâmica de não-equilíbrio: <i>quenches</i>	12
1.3	Efeito cone de luz	15
1.4	Modelo de Heisenberg XXZ	17
2	CONE DE LUZ DE SPINONS E ESTADOS LIGADOS EM UMA CADEIA DE HEISENBERG XXZ	21
2.1	Protocolo de <i>quench</i> e quantidades observadas	22
2.2	Efeito cone de luz	25
2.3	Cone de luz dos spinons	28
2.4	Cone de luz dos estados ligados	32
2.5	Dependência com δ	37
2.6	Comportamento assintótico	38
2.7	Conclusão	41
3	PROPRIEDADE DE BLINDAGEM NO MODELO DE ISING COM CAMPO TRANSVERSO	43
3.1	Modelo de Ising com campo transversal	43
3.2	Propriedade de blindagem	44
3.3	Dinâmica	47
3.4	Conclusão	49
	Parte II: Cadeia de spin como sistema quântico aberto	51
4	DINÂMICA DE SISTEMAS QUÂNTICOS ABERTOS	53
4.1	Introdução	53
4.2	Cadeia com reservatórios magnéticos nas extremidades	56
4.2.1	Correntes de spin e de energia	58
4.2.2	Obtenção do estado estacionário de não equilíbrio (NESS)	61
4.3	Regimes de transporte para o modelo XXZ	64

5	RETIFICAÇÃO EM UMA CADEIA DE SPINS COM RESERVATÓRIOS NAS EXTREMIDADES	67
5.1	Retificação	69
5.1.1	Assimetrias <i>graded</i>	71
5.2	Resultados: Controle e Manipulação da corrente de energia	73
5.2.1	Comportamento em função do parâmetro de anisotropia	75
5.2.2	Mudança no grau de assimetria	80
5.2.2.1	Dependência da inversão de corrente h e ζ para cadeias com $N = 5$ e com $N = 7$ sítios	83
5.3	Cadeias em “fases” diferentes	86
5.3.1	Assimetria acumulativa	89
5.4	Conclusão	92
	Conclusão	93
	Referências	97

APÊNDICES **109**

	APÊNDICE A – RESULTADOS PARA O MODELO XXZ	111
A.1	Transformada de Jordan-Wigner	111
A.2	Obtenção de Δ^*	112
	APÊNDICE B – INTRODUÇÃO AO DMRG E T-DMRG	115
B.1	DMRG: parte infinita	115
B.2	DMRG: parte finita	118
B.3	t-DMRG: evolução temporal	119
	APÊNDICE C – MÉTODO DE INTERAÇÕES REPETIDAS, DISSIPADORES E CORRENTES DE SPIN E ENERGIA 123	
C.1	Método de interações repetidas	123
C.2	Dissipadores da equação de Lindblad	125
C.3	Correntes de spin e energia	127
	APÊNDICE D – RESULTADOS COMPLEMENTARES SOBRE O CONTROLE E MANIPULAÇÃO DA CORRENTE DE ENERGIA	133
D.1	Cadeia com $N = 3$ sítios	133
D.2	Cadeia com $N = 7$ sítios	134
D.2.1	Mudança do grau de assimetria para assimetria delimitada	136
D.2.2	Evolução temporal das correntes de spin e energia	137

Introdução

Ao estudar sistemas de muitos corpos, como um sólido, por exemplo, temos que tratar de um número muito elevado de partículas, da ordem de 10^{23} . Em certos sistemas a interação entre elas pode ser desprezada e “bastaria” resolver a equação de Schrödinger para uma partícula e as soluções das demais seriam as mesmas. No entanto, existem muitos fenômenos interessantes; como transições de fase, supercondutividade, magnetismo, entre outros, que surgem quando a interação entre as partículas não pode ser desprezada. Quando as interações são fortes o suficiente para não serem tratadas perturbativamente, dizemos que o sistema é fortemente interagente.

Na tentativa de descrever as propriedades apresentadas por sólidos surgem modelos teóricos que apresentam aproximações simplificadas comparadas às complexidades dos materiais reais. Tais modelos partem do princípio de levar em conta somente os graus de liberdade mais relevantes para a explicação de certo fenômeno. Um exemplo é o modelo de Hubbard, que descreve a dinâmica dos elétrons da banda de condução via um termo de energia cinética, como se fossem partículas livres, e um termo de interação entre eles. A competição entre esses dois termos explica a transição metal-isolante de Mott. Um outro modelo que tem origem no princípio de exclusão de Pauli e repulsão coulombiana é o modelo de Heisenberg, onde somente os graus de liberdade de spin são levados em conta. Esse modelo pode ser usado para explicar ordenamento magnético. Embora tais modelos sejam simplificados, suas soluções podem ser extremamente complexas e difíceis de serem obtidas.

Um outro fator importante no estudo de sistemas de muitos corpos é a dimensionalidade. Um tratamento teórico conhecido como teoria do Líquido de Fermi, desenvolvida por Landau no final dos anos 50, descreve uma classe desses sistemas em duas e três dimensões. Nesta teoria as excitações de um sistema interagente são descritas por quasipartículas não interagentes com a massa renormalizada [1]. No entanto, a teoria do Líquido de Fermi não é aplicada a sistemas de uma dimensão ($1D$). Uma diferença simples que observa-se em uma dimensão é o próprio movimento possível das partículas. Nesse caso, para os elétrons se propagarem eles tem que “empurrar” seus vizinhos, portanto nenhum movimento é individual. As propriedades de sistemas $1D$ são descritas pela teoria do Líquido de Luttinger [1]. Além do interesse teórico, existem vários sistemas físicos que são descritos efetivamente por modelos $1D$, tais como nanotubos de carbono, fios semicondutores, além de cristais orgânicos que apresentam alta anisotropia e têm condutância preferencial em uma certa direção [2].

Em nosso trabalho estamos interessados em sistemas unidimensionais, mais especifi-

camente em cadeias de spins. Apesar de ter o número de graus de liberdade menor do que em sistemas de dimensões maiores, sistemas interagentes em uma dimensão também apresentam alta complexidade na sua análise teórica. Em $1D$, existem técnicas analíticas, como por exemplo o *ansatz* de Bethe, que conseguem obter todo o espectro de alguns modelos [3], além da técnica de bosonização, onde um sistema fermiônico é mapeado em um sistema bosônico [4]. Numericamente, pode-se fazer um tratamento exato, via diagonalização exata. No entanto, uma vez que a dimensão do espaço de Hilbert cresce exponencialmente com o tamanho do sistema (d^N , onde d é dimensão local do sítio), essa abordagem só é possível para cadeias com poucas dezenas de sítios. Para tratar sistemas maiores, são necessárias outras ferramentas que envolvam algum tipo de aproximação. Neste contexto, uma técnica numérica desenvolvida por Steven White em 1992, conhecida como *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG), consegue obter com grande precisão o estado fundamental de sistemas $1D$ fazendo uma truncagem do espaço de Hilbert [5,6]. Essa técnica fez grande sucesso e impulsionou o estudo teórico de sistemas $1D$.

Recentemente, a dinâmica de não-equilíbrio de sistemas fortemente interagentes tem recebido grande interesse devido aos avanços de técnicas numéricas que possibilitam obter a evolução temporal do sistema. Esse é o caso da técnica t-DMRG (*time dependent Density Matrix Renormalization Group*), que é uma extensão do DMRG [7,8]; ela permite obter a evolução temporal tendo como estado inicial, por exemplo, o estado fundamental obtido no DMRG.

Outro ponto que chamou a atenção da comunidade científica foi a possibilidade de simular modelos teóricos de sistemas de muitos corpos em experimentos de redes óticas [9–14]. Em tais experimentos, átomos são aprisionados em um potencial periódico gerado pela superposição de feixes de lasers contra-propagantes. Uma grande vantagem é que há um alto controle por parte dos experimentais em relação à geometria e à profundidade dos potenciais, o que reflete no alto controle dos parâmetros dos sistemas que estão sendo simulados.

No tipo de experimento citado acima, o sistema de interesse interage muito fracamente com o ambiente, proporcionando uma dinâmica unitária e coerente para tempos longos. Devido ao alto controle dos parâmetros, tais experimentos permitem levar o sistema a uma situação fora do equilíbrio por meio de *quenches* [9,15]. Um protocolo típico de *quench* é inicialmente preparar o sistema em um autoestado de um hamiltoniano H_0 e então rapidamente mudar algum parâmetro, como por exemplo campo magnético ou força de interação, deixando o sistema evoluir sob ação desse novo hamiltoniano H . Os *quenches* podem ser globais ou locais: para o primeiro caso, um parâmetro global do hamiltoniano, como por exemplo o campo magnético atuando em toda a cadeia, é abruptamente modificado. Esse tipo de *quench* é comumente utilizado para investigar questões associadas à relaxação e termalização [16–22]. No segundo caso, o hamiltoniano é

modificado somente localmente – por exemplo, o campo magnético pode ser ligado em uma parte do sistema, ou até mesmo em um sítio. Nesse cenário, a situação de não-equilíbrio tem sido usada para estudar propriedades de transporte, propagação de informação e correlações e a emergência de estados estacionários de não equilíbrio [23–33].

No contexto de perturbações locais, um trabalho seminal de Lieb e Robinson [34] é de grande relevância: apesar da equação de Schrödinger ser não relativística, o que significa que não há uma velocidade limite para a propagação de informação, eles mostraram que, para sistemas de muitos corpos com interação de curto alcance, a informação se propaga com uma velocidade limitada, levando à formação de um cone de luz. Em outras palavras, ao fazermos uma perturbação local em um sistema com interação de curto alcance, o efeito dessa perturbação seria sentido por sítios a uma distância d do local perturbado após um tempo $t = d/v$, onde v é a velocidade de propagação dessa informação. O termo cone de luz foi apropriado da teoria da relatividade, onde, dado um certo evento, há um cone de luz associado que define uma região causal, ou seja, nada que é causado por esse evento pode ser observado fora do cone de luz. Em relatividade esse cone de luz é limitado pela velocidade da luz c , já no contexto de Lieb e Robinson ele é limitado por $v < c$ dado pelos parâmetros do modelo. Esse cone de luz efetivo foi confirmado numericamente [26, 35–44] e recentemente em experimentos de átomos frios [45] e íons armadilhados [46]. A dependência do cone de luz com a forma como o *quench* é feito e com os parâmetros do sistema ainda é uma questão em aberto.

Ao prepararmos o sistema no estado fundamental, podemos dizer que ele está no estado de vácuo; ao perturbá-lo, estamos retirando-o do estado de vácuo e criando excitações que se propagam ao longo do sistema. Essas excitações carregam informação da perturbação e espera-se que o cone de luz seja definido pela velocidade das excitações mais rápidas. Com isso em mente, podemos fazer o raciocínio contrário: uma vez definido o cone de luz, ou seja, conhecida sua velocidade, podemos utilizá-lo para identificar excitações, como por exemplo estados ligados em uma dada evolução após um *quench* local [47].

Ainda pensando em sistemas em $1D$, além de *quenches*, um outro mecanismo que leva a uma dinâmica de não equilíbrio é o acoplamento de reservatórios nas extremidades de uma cadeia. Tais reservatórios podem fornecer ou absorver partículas [48], bem como induzir certa magnetização [49, 50]. Nesse caso dizemos que a cadeia é considerada um sistema quântico aberto, uma vez que os reservatórios apresentam muitos graus de liberdade e não estamos interessados em sua dinâmica; a situação é semelhante à interação de um sistema quântico com o ambiente que o envolve. Diferentemente da dinâmica gerada pelos *quenches*, aqui a evolução não é mais unitária e é necessariamente descrita por uma equação mestra [51]. Caso os reservatórios forneçam uma dinâmica Markoviana, isto é, o estado do sistema no tempo futuro t' só depende do tempo presente t e não depende de um tempo passado t_0 , a equação mestra pode ser escrita na forma de Lindblad.

O interesse em estudar sistemas acoplados a reservatórios está na análise do estado de equilíbrio. Os reservatórios podem atuar de forma diferente em cada extremidade, por exemplo, induzindo magnetização em direções diferentes ou fornecendo partícula em uma extremidade e absorvendo na outra. Para o caso em que os reservatórios estão desbalanceados, o estado assintótico é um estado estacionário de não equilíbrio, conhecido como *Non Equilibrium Steady State* (NESS), cuja característica é que os fluxos, seja de magnetização ou de partículas, são uniformes, constantes e não nulos. Muitos trabalhos na literatura encontram o NESS numericamente via DMRG escrito no formalismo de *Matrix Product State* (MPS) [49, 50, 52, 53] e, para casos como o modelo XXZ, conseguem obter sua forma exata [54, 55].

Para cadeias de spins acopladas a reservatórios magnéticos desbalanceados, aparece um fluxo de magnetização, que está associado a uma corrente de spins via equação da continuidade, da mesma maneira que o fluxo de carga está associado com corrente elétrica no eletromagnetismo. Portanto, a condição de que, no NESS, os fluxos que surgem no sistema sejam constantes implica que a corrente de spin também é constante. Na verdade, esse é um critério que pode ser usado para definir que o sistema atingiu o NESS. Para o modelo XXZ, existem resultados que caracterizam a corrente de spin quanto a um transporte ser balístico ou difusivo, esses dois tipos de comportamentos dependem do parâmetro de anisotropia do modelo [55]. Além da corrente de spins, o perfil de magnetização da cadeia no NESS é outra quantidade explorada. Se aplicarmos um campo externo ao longo da cadeia, há o aparecimento de uma corrente de energia. Do mesmo modo como é feito com a corrente de spin, pode-se caracterizar os regimes de transporte da corrente de energia bem como do perfil de magnetização de acordo com o parâmetro de anisotropia [50, 53]. Essa caracterização quanto a regimes de transporte das correntes de spin e energia também é feita com a presença de desordem no sistema [56, 57].

Uma vez definidos os reservatórios, e estes sendo desbalanceados, surge uma corrente de spin ao longo da cadeia, indo de um reservatório para o outro. Ao inverter esses reservatórios, a corrente inverte de sentido e, se a cadeia for homogênea, as correntes são iguais em módulo. No entanto, podemos introduzir assimetrias no sistema de tal modo que a corrente flui com módulo diferente de acordo com seu sentido de propagação. Quando isso acontece, dizemos que houve retificação no sistema. A retificação é um fenômeno mais geral, não sendo aplicado somente à corrente de spins, podendo aparecer em correntes de partículas, de energia e de calor. Ela existe sempre que há diferença na corrente de acordo com seu sentido de propagação, ou seja, sempre que há o favorecimento da propagação da corrente em um dado sentido. Esse efeito é amplamente estudado em sistemas clássicos e apresenta uma série de aplicações tecnológicas como o diodo. No entanto, ainda é pouco estudado em sistemas quânticos [58–60].

Para que haja retificação, o sistema deve apresentar uma certa assimetria, uma vez

que, para sistemas simétricos, o fluxo independe do sentido. No entanto, nem todo tipo de assimetria gera retificação. Foi observada retificação no modelo XXZ incorporando assimetria *graded* no sistema [59,60]. Este tipo de assimetria é gerada por uma variação gradual de um dos parâmetros do hamiltoniano. A riqueza de estudar cadeias de spins é que podemos obter tanto corrente de spins quanto de energia e além disso pode ocorrer retificação em uma quantidade e na outra não.

Vemos então que é possível gerar situações de não equilíbrio tanto em sistemas isolados quanto em sistemas abertos. Em nosso trabalho abordamos os dois casos. Esta tese está dividida em duas partes: na primeira trataremos a cadeia de spin como um sistema isolado e, na segunda, a cadeia de spin será um sistema quântico aberto.

A parte I é composta por dois trabalhos. No primeiro trabalho analisamos a dinâmica de não equilíbrio gerada por um *quench* local em uma cadeia de spin-1/2 descrita pelo modelo XXZ de Heisenberg. Conectamos duas cadeias finitas em fases distintas e observamos a evolução temporal da magnetização por sítio e da entropia de emaranhamento. Nossos resultados indicam a presença de um cone de luz efetivo de mesma velocidade em ambas as quantidades, associada a um tipo de excitação do modelo considerado. Este trabalho foi publicado na revista *Physical Review B* no ano de 2017 [61]. O segundo desta parte foi um trabalho em colaboração, onde investigamos uma propriedade de blindagem que surge no modelo de Ising com campo transversal quando o campo de apenas um sítio é nulo. Embora essa propriedade não tenha surgido no contexto de dinâmica, aplicamos um *quench* local na cadeia e observamos qual o efeito, na dinâmica de magnetização, quando temos um sítio com campo nulo no meio da cadeia. Esse trabalho foi publicado na *Physical Review E* no ano de 2018 [62].

Na parte II, analisamos a retificação na corrente de spin e energia em uma cadeia de spin-1/2 descrita pelo modelo XXZ. Para observar retificação utilizamos assimetria *graded* em um campo magnético externo e no parâmetro de anisotropia do modelo. Mais especificamente, estudamos o controle e a manipulação das correntes e suas retificações através de mecanismos externos. Essa questão tem grande interesse prático e acreditamos que futuramente possa motivar a criação de dispositivos. Outro ponto investigado foi qual o papel das fases desse sistema nas correntes e nas retificações. Esse trabalho ainda está em andamento e uma parte que foi finalizada pode ser encontrada em [63]. Veremos que esse sistema apresenta um universo de possibilidades e tem muito a ser explorado.

Esta tese está estruturada da seguinte forma: na parte I, em que a cadeia de spin é considerada como sistema isolado, faremos, no capítulo 1, uma revisão da literatura relacionada ao nosso primeiro trabalho; no capítulo 2, apresentaremos e discutiremos os resultados do trabalho sobre *quench* local na cadeia XXZ; terminaremos essa parte I com o capítulo 3, onde mostraremos os resultados do trabalho em colaboração, sobre o modelo de Ising, com um foco na minha contribuição relacionada às simulações. Já na

parte II, a cadeia XXZ é tratada como sistema quântico aberto. Assim como foi feito na primeira parte, começaremos com uma revisão de literatura para esse tipo de sistema com reservatório, apresentada no capítulo 4; em seguida, no capítulo 5, detalharemos nossos resultados. Por fim, iremos apresentar uma conclusão global sobre todos os trabalhos. Nos apêndices abordaremos alguns detalhes a respeito do modelo XXZ (A), da técnica DMRG (B), a dedução da equação mestra e das correntes de spin e energia (C) e alguns resultados complementares do nosso terceiro trabalho de doutorado (D).

Parte I: Cadeia de spin como sistema quântico fechado

1 *Quenches* quânticos e cadeia XXZ

Como foi apresentado na introdução, esta tese está dividida em duas partes: a primeira tratando a cadeia de spin como um sistema fechado; já na segunda parte a cadeia está interagindo com reservatórios, portanto a dinâmica já não é mais unitária. Neste capítulo faremos uma breve revisão da literatura voltada para sistemas fechados; como essa área de sistemas fortemente interagente é muito extensa ficaremos com o foco voltado para elementos que aparecem no nosso trabalho. Daremos uma motivação experimental com possíveis realizações de sistemas de spin em redes óticas; em seguida discutiremos alguns resultados de dinâmica de não equilíbrio gerada por *quenches* e seu uso para estudar regimes de transporte; abordaremos o efeito cone de luz como consequência da dinâmica gerada por um *quench*, mostrando que esse efeito foi observado experimentalmente; por fim detalharemos o modelo XXZ de Heisenberg, que foi o modelo explorado no nosso primeiro trabalho.

1.1 Experimentos com redes óticas

O interesse teórico em estudar sistemas fortemente correlacionados é justificado por toda física nova que emerge das interações. Um outro fator que contribuiu para o destaque recente em tal área foi o aparecimento de experimentos realizados com átomos frios em redes óticas. Tais experimentos são ótimos simuladores de sistemas de muitos corpos.

As redes óticas são formadas pela superposição de dois feixes de lasers contra-propagantes. A interferência desses feixes forma um potencial periódico onde os átomos podem ser aprisionados [10]. Dependendo da forma como esses lasers se interferem pode-se gerar potenciais em uma, duas e três dimensões. A Figura 1 foi retirada da referência [10] e ilustra essas diferentes superposições gerando diferentes perfis de potenciais. No painel (a), temos uma superposição de lasers ortogonais formando uma rede de potenciais $1D$; enquanto que no painel (b), temos uma configuração que simula uma rede $3D$.

Uma grande vantagem de usar lasers para criar esses potenciais periódicos é que a geometria da rede gerada e a profundidade dos poços de potenciais são completamente controladas pelos experimentalistas. A geometria pode ser alterada mudando o ângulo de interferência entre os lasers, enquanto que a profundidade do potencial está associada com sua intensidade.

Com essa grande liberdade de poder controlar os parâmetros do sistema, as redes óticas podem ser usadas para simular hamiltonianos que descrevem certos tipos de intera-

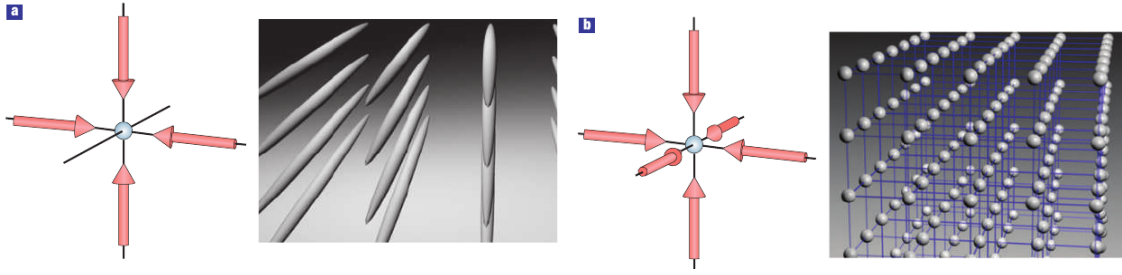


Figura 1 – Rede ótica formada pela interferência de lasers. Painel (a): rede em forma de tubos de potenciais $1D$. Painel (b): representação de uma rede $3D$. A figura foi retirada da referência [10].

ções entre partículas. Usando essa capacidade de poder controlar a profundidade do poço de potencial, foi possível observar a transição superfluido para isolante de Mott em um sistema bosônico. A fase superfluida foi obtida escolhendo-se uma profundidade pequena do potencial, favorecendo o movimento dos átomos, enquanto que a fase isolante foi observada aumentando-se a profundidade dos poços. A Figura 2, retirada da referência [10], ilustra essas duas configurações. No painel (a) observamos a fase superfluida e no painel (b) temos um átomo por sítio, característico da fase isolante.

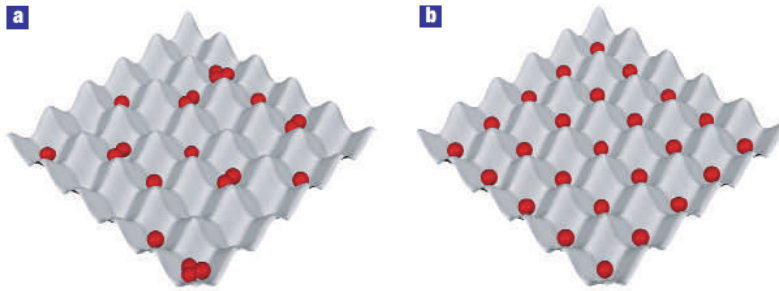


Figura 2 – Representação da transição da fase superfluida para a fase isolante de Mott em uma rede ótica. O painel (a) representa a fase superfluida, enquanto que no painel (b) temos a fase isolante de Mott. A figura foi retirada da referência [10].

Não são somente modelos de partículas que podem ser simulados em redes óticas. Existem técnicas, via ajustes dos potenciais óticos, que possibilitam a indução e o controle da interação entre estados de spins de átomos vizinhos em uma rede ótica [13]. Na referência [13] os autores obtiveram hamiltonianos de interação entre spins a partir de sistemas compostos tanto por átomos bosônicos quanto fermiônicos. Para isso os átomos deveriam estar no regime de isolante de Mott, semelhante ao painel (b) da Figura 2, com a ocupação de um átomo por sítio. Cada átomo tem dois estados internos que são denotados com o índice de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, respectivamente. Cada laser cria um potencial periódico $V_{\mu\sigma} \sin^2(\vec{k}_\mu \cdot \vec{r})$ em certa direção μ , sendo \vec{k}_μ o vetor de onda da luz. Para um potencial periódico suficientemente forte e para baixas temperaturas, o hamiltoniano do sistema é

dado por

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (t_{\mu\sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + h.c.) + \frac{1}{2} \sum_{i,\sigma} U_\sigma n_{i\sigma} (n_{i\sigma} - 1) + U_{\uparrow\downarrow} \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1.1)$$

onde $\langle i, j \rangle$ são sítios vizinhos na direção μ , $a_{i\sigma}$ é o operador de destruição (bosônico ou fermiônico) para átomos de spin σ localizados no sítio i e $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ é o operador número que fornece o número de átomos de spin σ no sítio i . O primeiro termo está relacionado com a energia cinética das partículas, enquanto que os dois últimos com a interação por sítio dos átomos, $U_{\uparrow\downarrow}$ é a amplitude da interação entre átomos com spins opostos, enquanto que $U_\sigma n_{i\sigma}$ é a amplitude da interação de átomos com mesmo spin. Observe que se os átomos forem fermiônicos o segundo termo é nulo.

Para uma rede cúbica os autores da referência [13] mostraram que $t_{i\sigma}$ decai exponencialmente com a amplitude do potencial periódico ($V_{\mu\sigma}$) enquanto que U_σ e $U_{\uparrow\downarrow}$ apresentam uma dependência fraca com $V_{\mu\sigma}$. No regime que os autores estão interessados, que no caso é o isolante de Mott com semi-preenchimento, tem-se que $t_{i\sigma} \ll U_\sigma, U_{\uparrow\downarrow}$ e $\langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle \approx 1$. Nesse regime $t_{i\sigma}$ pode ser tratado com teoria de perturbação e o hamiltoniano da equação 1.1 se reduz ao seguinte hamiltoniano

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} [\lambda_{\mu z} \sigma_i^Z \sigma_j^Z \pm \lambda_{\mu\perp} (\sigma_i^X \sigma_j^X + \sigma_i^Y \sigma_j^Y)], \quad (1.2)$$

onde $\sigma_i^Z = n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}$, $\sigma_i^X = a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow} + a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow}$ e $\sigma_i^Y = -i(a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow} - a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow})$ são os operadores usuais de spin. Os sinais + e - antes de $\lambda_{\mu\perp}$ correspondem ao caso de átomos fermiônicos e bosônicos, respectivamente. Os parâmetros $\lambda_{\mu z}$ e $\lambda_{\mu\perp}$ para átomos bosônicos são dados por

$$\lambda_{\mu z} = \frac{t_{\mu\uparrow}^2 + t_{\mu\downarrow}^2}{2U_{\uparrow\downarrow}} - \frac{t_{\mu\downarrow}^2}{U_\uparrow} - \frac{t_{\mu\uparrow}^2}{U_\downarrow}, \quad \lambda_{\mu\perp} = \frac{t_{\mu\uparrow} t_{\mu\downarrow}}{U_{\uparrow\downarrow}}, \quad (1.3)$$

para átomos fermiônicos a expressão é a mesma, a única diferença é que em $\lambda_{\mu z}$ os dois últimos termos são desprezíveis uma vez que $U_\sigma \gg U_{\uparrow\downarrow}$.

O hamiltoniano da equação 1.2 é justamente o hamiltoniano do modelo XXZ de Heisenberg, sobre o qual daremos mais detalhes na próxima seção. Note portanto que, nesses sistemas de redes óticas, os parâmetros $\lambda_{\mu z}$ e $\lambda_{\mu\perp}$ podem ser facilmente controlados, ajustando-se a intensidade dos feixes dos lasers.

Outra forma de realizar modelos de spin em redes óticas foi usada na referência [64]. Nesse trabalho o modelo de Heisenberg é implementado em um potencial duplo, gerando uma interação entre os spins dos átomos de cada poço de potencial. De modo similar ao trabalho anterior, eles preparam o sistema de átomos bosônicos em estados de spins diferentes. Esse sistema é descrito pelo modelo de Bose-Hubbard. No limite em que o termo de interação é muito maior que o termo de *hopping*, primeiro e último termos da equação 1.1, respectivamente, obtém-se o modelo de Heisenberg. Os autores argumentam

que, mudando o potencial da rede, eles conseguem controlar a interação de troca e dessa forma podem alternar entre o regime ferromagnético e antiferromagnético.

Temos então que a grande vantagem de usar redes óticas como simuladores de sistemas de muitos corpos é o amplo controle dos parâmetros por parte dos experimentais. Sendo que não são somente modelos de partículas que podem ser simulados. É importante ressaltar que estes experimentos podem ser usados para estudar, além de estados fundamentais, situações que envolvem dinâmica.

1.2 Dinâmica de não-equilíbrio: *quenches*

O foco deste nosso primeiro trabalho foi estudar a dinâmica de não-equilíbrio gerada por um *quench* local em uma cadeia de spin-1/2 descrita pelo modelo XXZ de Heisenberg. No entanto, antes de entrarmos em detalhes sobre o nosso trabalho, vamos definir *quenches* e apresentar alguns resultados da literatura que envolvem essa abordagem. Em particular, vamos dar um destaque especial para resultados que envolvem o modelo que consideramos.

Uma das formas de se gerar uma dinâmica de não-equilíbrio é realizar uma mudança abrupta no hamiltoniano que descreve o sistema, conhecida como *quench*. A ideia é preparar o estado inicial do sistema $|\psi(0)\rangle$ como sendo um dos autoestados do hamiltoniano H , ou seja, $H|\psi(0)\rangle = E_i|\psi(0)\rangle$. Subitamente muda-se algum parâmetro do hamiltoniano original levando-o a um novo hamiltoniano \tilde{H} , e então deixa-se o sistema evoluir através do novo hamiltoniano, isto é, $|\psi(t)\rangle = e^{i\tilde{H}t}|\psi(0)\rangle$. Note que agora o estado inicial já não é autoestado de \tilde{H} . Portanto o sistema foi retirado do estado de equilíbrio, ou seja, o estado inicial $|\psi(0)\rangle$ não é um estado estacionário do novo hamiltoniano. O *quench* pode ser global, onde o hamiltoniano é mudado globalmente, como por exemplo ao se ligar um campo externo sobre todo o sistema; ou a mudança pode ser local, um exemplo é ligar ou alterar o campo de somente um sítio ou uma região do sistema.

Além dessa clara diferença com a forma em que são realizados esses dois tipos de *quenches*, existe uma questão a respeito de como o emaranhamento cresce após um *quench*. Suponha que queremos calcular o emaranhamento entre a região A e B de uma cadeia como ilustra a Figura 3, que foi retirada da referência [65]. No painel (a), a região A é finita de tamanho l e a região B é a parte complementar da cadeia; no painel (b), temos uma configuração diferente, a cadeia é dividida ao meio, sendo uma metade a região A e a outra a região B . Nesta figura estão indicados dois instantes de tempo: o tempo $t = 0$, momento que o *quench* foi realizado; e um tempo posterior t .

Ao realizarmos um *quench*, pares de quasipartículas emaranhadas entre si emergem da região onde ele foi feito. Portanto o emaranhamento entre as duas regiões é influenciado por esses pares de excitações, mais especificamente temos uma contribuição quando uma

das quasipartículas que compõe o par está na região A e a outra na região B .

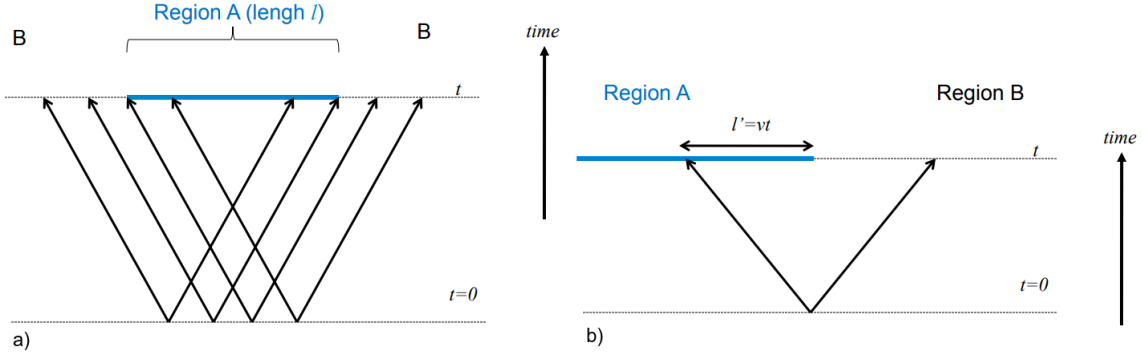


Figura 3 – Representação dos pares de quasipartículas emaranhadas após um *quench* global, painel (a), e um *quench* local, painel (b). O emaranhamento entre as regiões A e B está associado com os pares de excitações que estas regiões compartilham. Figura retirada da referência [65].

O painel (a) da Figura 3 ilustra essa ideia para um *quench* global. Nesse caso, temos um número muito grande dessas quasipartículas, portanto o emaranhamento cresce linearmente com o tempo. Para tempo muito longo ele satura, pois o número de pares que ficam divididos entre as duas regiões para de aumentar [66]. O painel (b) da mesma figura apresenta uma situação após um *quench* local. Note que o número de excitações é bem menor em comparação ao caso anterior. Se as duas partes da cadeia, ilustrada no painel (b), forem semi-infinitas o emaranhamento tem um crescimento logarítmico com o tempo [67]. Do ponto de vista de simulação de evolução temporal via t-DMRG, o último caso é mais fácil de simular numericamente, tendo em vista a pouca geração de emaranhamento comparado com o primeiro caso.

Usando essa interpretação de quasipartículas geradas após um *quench*, os autores da referência [27] realizaram um *quench* local duplo em cadeia de Ising com campo transversal definido pelo seguinte hamiltoniano

$$H = - \left(\sum_i J_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + h_i \sigma_i^z \right), \quad (1.4)$$

onde J_i e h_i são os parâmetros de interação entre os sítios vizinhos e o campo transversal, respectivamente, σ_i^x e σ_i^z são as matrizes de Pauli no sítio i .

Foi calculado o echo de Loschmidt¹, $|\langle \psi(t) | \psi(0) \rangle|^2$, e a entropia de emaranhamento, que definiremos mais adiante, em função do tempo, como reproduzido nos painéis (a) e (b), respectivamente, da Figura 4. Os picos observados nessas quantidades estão associados com as quasipartículas geradas pelos dois *quenches*. O *quench* duplo realizado foi: a junção de duas cadeias; e a mudança do campo externo em um sítio $i = L$ somando um valor δ , isto é, $h_L \rightarrow h_L + \delta$.

¹ O echo de Loschmidt é uma medida de o quão distante o estado evoluído $|\psi(t)\rangle$ está do estado inicial $|\psi(0)\rangle$.

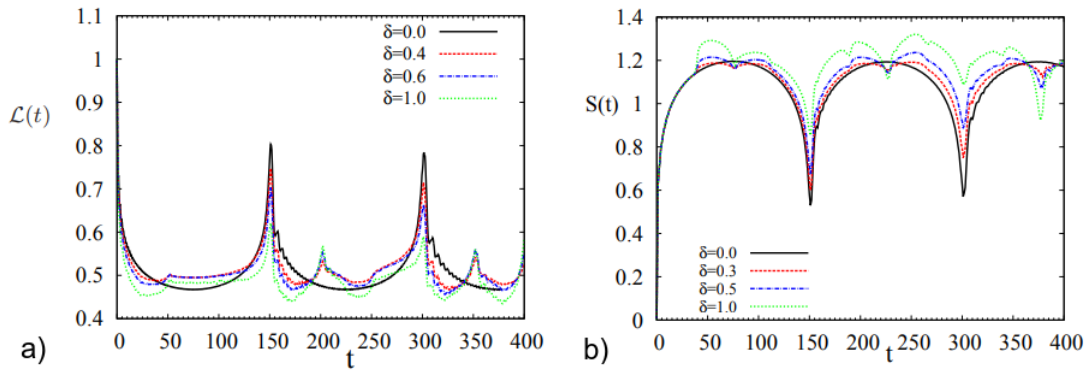


Figura 4 – Echo de Loschmidt, painel (a), e entropia de emaranhamento, painel (b), em função do tempo para um *quench* duplo em uma cadeia de Ising com campo transversal. O *quench* constitui da junção de duas cadeias, e da mudança do campo transversal em um sítio $i = L$ por δ , isto é, $h_L \rightarrow h_L + \delta$. Figura retirada da referência [27].

Os autores argumentam que as quasipartículas se propagam pela cadeia, a partir do ponto em que foi gerado o *quench*, e são refletidas de volta pelas extremidades. No momento em que essas quasipartículas se reencontram o estado do sistema se aproxima do estado inicial, portanto há o aparecimento de um pico aumentando o echo de Loschmidt e diminuindo a entropia de emaranhamento. Esse tempo está associado com a velocidade dessas excitações, sendo que essas velocidades dependem do modelo considerado.

Outro estudo envolvendo *quenches* locais é a respeito de propriedades de transporte do modelo XXZ, descrito pelo hamiltoniano

$$H = J \sum_{i=1}^{N-1} \left(S_i^X S_{i+1}^X + S_i^Y S_{i+1}^Y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z \right), \quad (1.5)$$

onde J é a constante de troca, Δ é o parâmetro de anisotropia e S^α , com $\alpha = X, Y, Z$, são os operadores de spin. Daremos mais detalhes desse modelo mais a frente.

Foi mostrado que o transporte de spin é balístico para $|\Delta| < 1$, e difusivo na fase antiferromagnética, $\Delta > 1$ [25]. Para isso os autores da referência [25] preparam o estado inicial do sistema em uma distribuição de magnetização não-homogênea, aplicando um campo magnético gaussiano na região central da cadeia. Em seguida eles desligam o campo e deixam o sistema evoluir. O regime de transporte é definido pela variância da magnetização. Se a dependência da variância com o tempo é quadrática, o transporte é balístico; se a dependência é linear no tempo, o transporte é difusivo. Os painéis (a) e (b) da Figura 5 apresentam a variância da magnetização em função do tempo dentro da fase crítica, painel (a), e na fase antiferromagnética, painel (b). Observe que à medida que Δ aumenta, painel (b), a variância tem uma dependência cada vez mais linear com o tempo.

Além do transporte de spin, foi também investigado o transporte de energia na cadeia XXZ [26]. De forma análoga ao realizado no transporte de spin, os autores preparam

o estado inicial com uma distribuição de energia não-homogênea e deixam o sistema evoluir com o hamiltoniano XXZ. Calculam então a variância da densidade de energia local e a partir dela definem os regimes de transporte. Diferentemente do caso anterior, em todas as fases o regime de transporte foi observado como balístico, conforme mostra o painel (c) da Figura 5.

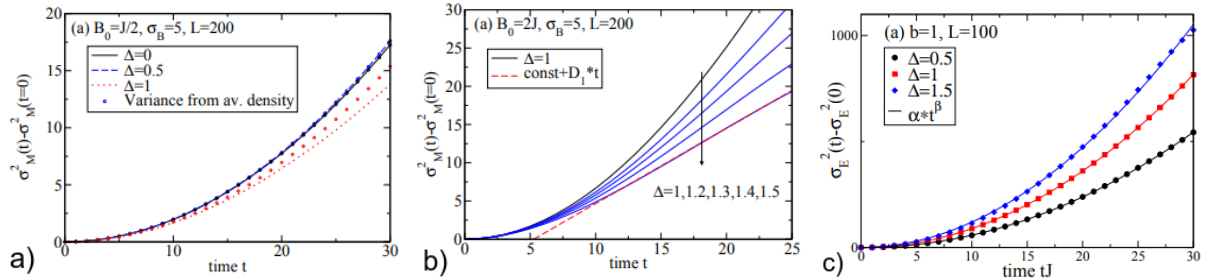


Figura 5 – Variância da magnetização em função do tempo para $|\Delta| < 1$, painel (a), e na fase antiferromagnética, painel (b). A cadeia tem $L = 200$ sítios, σ_B é a variância do campo Gaussiano onde B_0 é a amplitude deste campo. Painéis (a) e (b) retirados da referência [25]. No painel (c) temos a variância da energia em função do tempo, retirada da referência [26]. Nesse caso a cadeia tem $L = 100$ sítios e a distribuição não-homogênea é através de um acoplamento ferromagnético entre b links em uma região da cadeia.

Os autores da referência [25] ainda argumentam que na fase antiferromagnética há um *gap* e isso dificulta o transporte de spin. Para que tenha transporte é necessário então que a perturbação consiga vencer esse *gap*. Esse efeito nós também observamos em nosso trabalho e será apresentado mais a frente.

1.3 Efeito cone de luz

Vamos considerar um sistema em uma dimensão como ilustrado no painel (a) da Figura 6, que pode ser uma cadeia de spin ou de partículas, por exemplo. Quando realizamos uma perturbação nesse sistema, por exemplo aplicando um campo na região A , o efeito gerado por ela se propaga ao longo da cadeia. Como a dinâmica é gerada via equação de Schrödinger, a princípio, nada impede que essa informação se propague instantaneamente, uma vez que a equação de Schrödinger é não-relativística. Portanto poderíamos observar o efeito da aplicação desse campo de forma imediata na região B . No entanto, foi mostrado que para sistemas com interação de curto alcance existe uma velocidade limite v para a propagação da informação [68].

Essa velocidade limite define um cone de luz para a propagação da informação. Embora o termo cone de luz originalmente tenha surgido no contexto de relatividade, o uso dele aqui se torna apropriado. Em relatividade, um dado evento define uma região causal (veja o painel (b) da Figura 6), ou seja, o efeito que foi gerado por esse evento

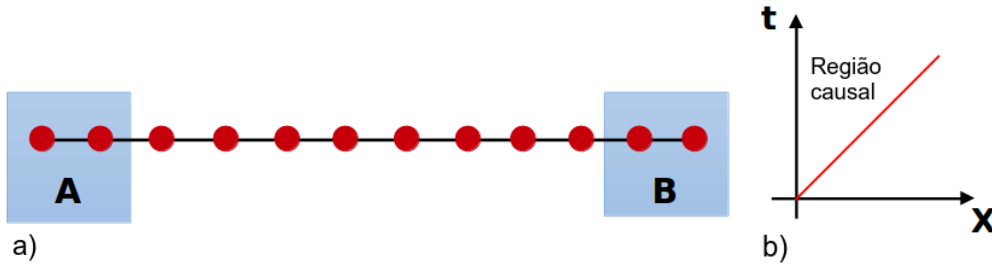


Figura 6 – Painel (a): representação de uma cadeia com duas regiões A e B em destaque. Painel (b): representação de um cone de luz e sua região causal.

só pode ser observado dentro dessa região. Em sistemas de muitos corpos com interação de curto alcance, observa-se algo semelhante: uma perturbação, que pode ser gerada via *quench*, gera efeitos que são observados significativamente dentro do cone de luz (ou região causal). Portanto, se aplicamos um campo na região A (painel (a) da Figura 6), o efeito desse campo na região B , localizada a uma distância d de A , é observado após um tempo $t = d/v$. Essa velocidade não é universal e veremos em nosso trabalho que ela está associada com a velocidade das excitações geradas pelo *quench*.

Esse cone de luz foi observado experimentalmente em sistemas formados com redes óticas [45]. Nesse trabalho os autores preparam uma cadeia de átomos bosônicos inicialmente no estado isolante de Mott e, então, subitamente eles diminuem a barreira de potencial e deixam o sistema evoluir, como mostrado no painel (a) da Figura 7.

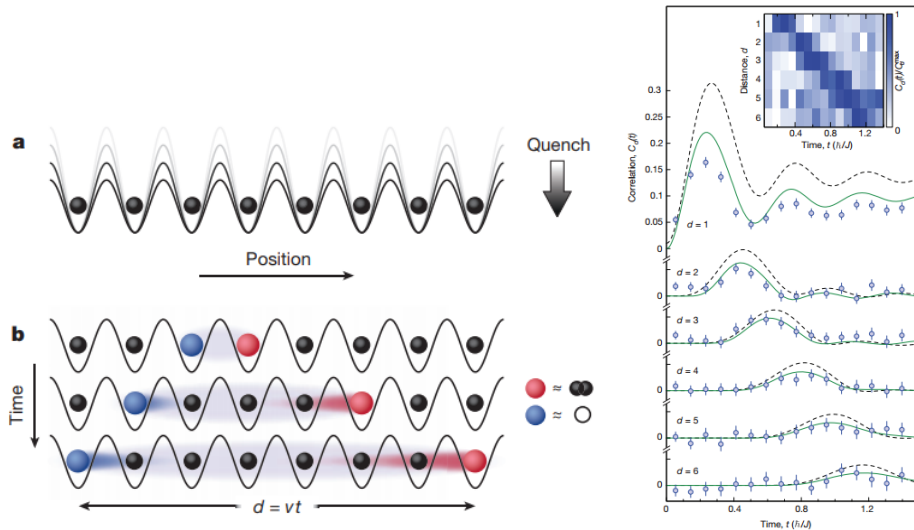


Figura 7 – No topo do painel (a) está representado o estado inicial, bem como a forma como é realizado o *quench*. Na parte inferior do painel (a), temos as quasipartículas do tipo holon (em azul) e doublon (em vermelho) se propagando pela cadeia. A função de correlação entre estas duas quasipartículas seguindo um cone de luz está representada no painel (b). A figura foi retirada da referência [45].

Depois do *quench*, o estado inicial é um estado altamente excitado do hamiltoniano

que governa a dinâmica do sistema. Os autores distinguem dois tipos de quasipartículas: *holon*, ausência de partículas em um sítio, e *doublon*, dupla ocupação no sítio, como ilustrado no painel (a) da Figura 7. Essas quasipartículas emergem emaranhadas e é medida a propagação dessas quasipartículas através de uma função de correlação entre elas, ilustrada no painel (b) da Figura 7. Observe que à medida que o tempo passa essa função de correlação apresenta valores apreciáveis para maiores distâncias entre as quasipartículas, formando um cone de luz como ilustrado na figura inserida no painel (b).

1.4 Modelo de Heisenberg XXZ

Em nosso trabalho nós analisamos uma cadeia de spin-1/2 com N sítios e condições abertas de contorno descrita pelo modelo XXZ de Heisenberg

$$H = J \sum_{i=1}^{N-1} \left(S_i^X S_{i+1}^X + S_i^Y S_{i+1}^Y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z \right), \quad (1.6)$$

onde S_i^α , $\alpha = X, Y, Z$, são os operadores locais de spin atuando no i -ésimo sítio da cadeia, que satisfazem a relação de comutação $[S_j^\alpha, S_{j'}^\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\delta_{j,j'}S_j^\gamma$. J é a constante de acoplamento de troca e Δ é o parâmetro de anisotropia. Ao longo do nosso trabalho definimos $J = 1$ como sendo nossa unidade de energia. O nome XXZ está associado com o fato das interações ao longo das componentes X e Y terem a mesma contribuição energética, enquanto que o termo que envolve a interação ao longo de Z apresenta um peso diferente. Vale ressaltar que este não é um modelo somente teórico; na seção 1.1, vimos que é possível realizá-lo em redes óticas e além disso ele pode ser usado para descrever certos compostos [69].

Esse modelo apresenta solução exata via *ansatz* de Bethe [70] em uma dimensão. Para o caso de spin-1/2 há três fases: uma fase sem *gap*, para $-1 < \Delta \leq 1$, que é descrita pela teoria do Líquido de Luttinger (*LL*), e duas fases com ordem de longo alcance e que apresentam *gap*: a fase antiferromagnética, para $\Delta > 1$, e a fase ferromagnética, para $\Delta < -1$. A Figura 8 ilustra o diagrama de fase para esse modelo.

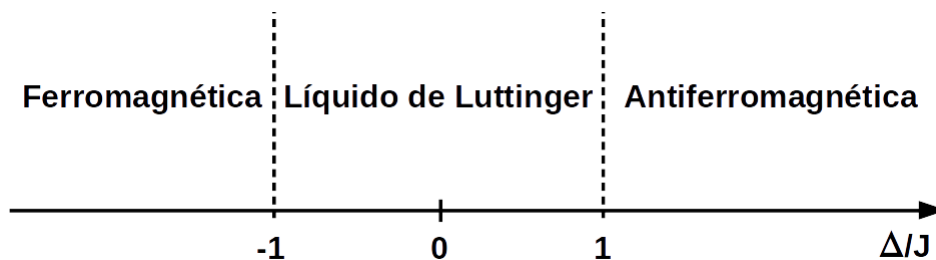


Figura 8 – Diagrama de fase do modelo XXZ de spin-1/2 em uma dimensão.

Olhando para o estado fundamental destas três fases temos que: na fase ferromagnética, há o favorecimento dos spins estarem alinhados; na antiferromagnética há o

favorecimento dos spins estarem anti-alinhados, e na fase LL não há ordem magnética, sendo a magnetização média nula.

Utilizando os operadores $S_i^\pm = S_i^X \pm iS_i^Y$ onde

$$S^+|\uparrow\rangle = 0; \quad S^+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle; \quad S^-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle; \quad S^-|\downarrow\rangle = 0, \quad (1.7)$$

podemos reescrever o hamiltoniano XXZ da seguinte forma

$$H = J \sum_{i=1}^{N-1} \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z \right], \quad (1.8)$$

Observe que o primeiro termo está associado com *flips* entre spins vizinhos, ou seja, quando atua em um estado $|\psi\rangle$ ele inverte o spin localizado no sítio i para cima e inverte o spin no sítio $i + 1$ para baixo. Logo, podemos ver que este termo tem um caráter cinético.

Usando as transformações de Jordan-Wigner, podemos mapear o modelo XXZ no modelo de férmions sem spins, dado pelo hamiltoniano [1]

$$H = \sum_i \left[-T(c_i^\dagger c_{i+1} + h.c) + U \left(c_i^\dagger c_i - \frac{1}{2} \right) \left(c_{i+1}^\dagger c_{i+1} - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (1.9)$$

onde $T = J/2$ é a amplitude do *hopping* e $U = J\Delta$ é a intensidade da interação. Os detalhes desta transformação estão apresentados no apêndice A.

O primeiro termo, que descreve o caso em que uma partícula é criada (destruída) no sítio i e destruída (criada) no sítio $i + 1$ com amplitude dada pelo *hopping* T , está associado à energia cinética dos férmions. Já o segundo termo fornece a energia de interação entre elétrons em sítios vizinhos, sendo $c_i^\dagger c_i$ o operador número, que conta o número de férmions no sítio i . Nesse mapeamento, o estado de spin $|\uparrow\rangle$ corresponde ao estado ocupado $|1\rangle$ por um férmion, enquanto que o estado de spin $|\downarrow\rangle$ corresponde ao estado vazio $|0\rangle$. A partir dessas relações, $\Delta < 0$ corresponde ao regime de interação atrativa e $\Delta > 0$ representa interação repulsiva entre os férmions. Para $\Delta = 0$, obtemos o modelo XX, que é equivalente ao de férmions livres. Todos os nossos resultados podem ser “traduzidos” para esse modelo e, em alguns casos, para facilitar a interpretação, pode ser útil pensar na linguagem de férmions ao invés da linguagem de spins.

A solução do modelo XXZ obtida via *ansatz* de Bethe² fornece não somente o estado fundamental, mas todo o espectro de excitações. Na fase LL , $-1 < \Delta \leq 1$, existem excitações elementares, conhecidas como spinons. Pensando na representação de férmions sem spin, spinons correspondem a excitações do tipo partículas e buracos, que surgem ao excitar partículas que estavam abaixo do nível de Fermi, como ilustrado no painel (a) da Figura 9.

² Para uma primeira leitura sobre o *ansatz* de Bethe sugerimos as referências [3, 71, 72].

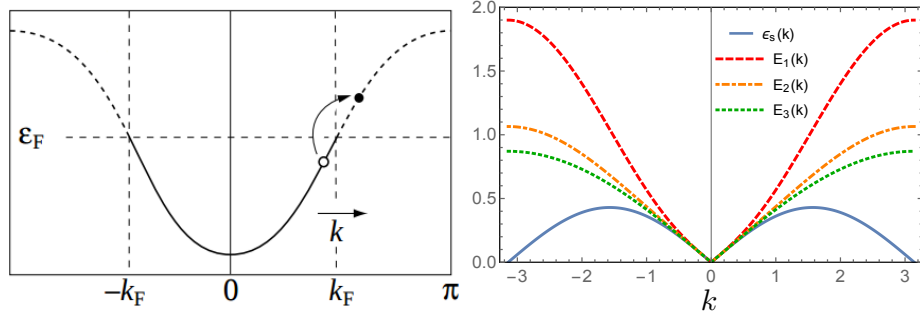


Figura 9 – (a) Relação de dispersão $\epsilon(k)$ mostrando excitações do tipo partícula-buraco. Figura retirada da Ref. [73]. (b) Relação de dispersão para os spinons, $\epsilon_s(k)$, e para três ramos de estados ligados, $E_n(k)$, para $\Delta = -0.75$. A velocidade máxima dos estados ligados $v_b \approx 0.866$ é dada pela inclinação de $E_1(k)$ no ponto de inflexão $k_0 \approx 1.533$.

A relação de dispersão para os spinons é dada por [70]

$$\epsilon_s(k) = v_s \sin k, \quad (1.10)$$

onde

$$v_s = \frac{\pi\sqrt{1-\Delta^2}}{2 \arccos \Delta} \quad (1.11)$$

pode ser identificado como a velocidade máxima atingida pelos spinons:

$$\max \left\{ \frac{d\epsilon_s}{dk} \right\} = v_s. \quad (1.12)$$

Um outro tipo de excitações obtidas via *ansatz* de Bethe são as chamadas *strings* [70], que podem ser interpretadas como estados ligados de partículas e buracos. No subespaço de magnetização nula, os estados ligados se formam acima do contínuo dos spinons, para $-1 < \Delta < 0$, veja painel (b) da Figura 9. A relação de dispersão para uma *string* de tamanho- n é dada por [70]

$$E_n(k) = \frac{\pi\sqrt{1-\Delta^2}}{\arccos \Delta} \left| \sin \left(\frac{k}{2} \right) \right| \sqrt{1 + \cot^2 \left[\frac{n\pi}{2} \left(\frac{\pi}{\arccos \Delta} - 1 \right) \right] \sin^2 \left(\frac{k}{2} \right)}, \quad (1.13)$$

onde $n = 1, 2, \dots, \left\lfloor \frac{\arccos \Delta}{\pi - \arccos \Delta} \right\rfloor$ e $\lfloor x \rfloor$ é a função menor inteiro. Note que o número de ramificações de estados ligados depende de Δ e aumenta à medida que nos aproximamos do ponto de transição $\Delta \rightarrow -1$; para qualquer $\Delta < 0$ existe pelo menos um estado ligado. Na linguagem fermiônica, esse estado pode ser visto como sendo composto por uma partícula e um buraco que interagem entre si e se ligam para qualquer valor de interação atrativa [74].

Para melhor visualização das dispersões dos spinons e estados ligados, no painel (b) da Figura 9, plotamos as respectivas dispersões dessas excitações, conforme equações 1.10 e 1.13, para $\Delta = -0.75$. Observe que para esse valor de anisotropia temos que $n = 3$, logo

teremos três ramos de estados ligados. Vale lembrar que no limite de Δ atrativo temos esses dois tipos de excitações.

A partir da relação de dispersão, equação 1.13, podemos ver que o estado ligado com $n = 1$ é o que apresenta maior velocidade. Focando neste caso e seguindo as discussões apresentadas na seção A.2 do apêndice A observamos que para $|\Delta|$ pequeno, a velocidade do estado ligado de $n = 1$ é uma função côncava de k , logo em $k = 0$ a velocidade é máxima. Enquanto que para $\Delta \rightarrow -1$ a velocidade em $k = 0$ se torna um mínimo local. Deve então existir um valor Δ^* no qual a velocidade em $k = 0$ sofre essa transição. Antes desse ponto $dv_b/dk < 0$ e depois dele $dv_b/dk > 0$, onde v_b é a velocidade dos estados ligados, logo esse ponto é um ponto de inflexão e podemos encontrá-lo exigindo a seguinte condição

$$\left. \frac{d^2 v_b}{dk^2} \right|_{k=0, \Delta=\Delta^*} = \left. \frac{d^3 E_1}{dk^3} \right|_{k=0, \Delta=\Delta^*} = 0. \quad (1.14)$$

que tem como solução

$$\Delta^* = \cos\left(\frac{3\pi}{5}\right) = \frac{1 - \sqrt{5}}{4} \approx -0.309. \quad (1.15)$$

Vemos que Δ^* é um ponto de transição: entre $\Delta^* < \Delta < 0$ a velocidade máxima dos estados ligados ocorre em $k = 0$ e tem o mesmo valor que a velocidade máxima dos spinons; para $-1 < \Delta < \Delta^*$ a velocidade máxima dos estados ligados ocorre em $k = k_0 > 0$ e ela se torna maior que v_s . Isso significa que para esse regime de Δ o estado ligado de $n = 1$ pode se propagar mais rápido que os spinons. Como exemplo, para o caso $\Delta = -0.75$, apresentado no painel (b) da Figura 9, temos que $v_b \approx 0.866$ e $k_0 \approx 1.533$, enquanto que $v_s \approx 0.4295$ e $k_0 = 0$.

Um outro tipo de excitação do modelo XXZ, existente na fase ferromagnética ($\Delta \leq -1$), é conhecida como mágnon. Diferentemente dos spinons e dos estados ligados, os mágnons apresentam *gap* [75] dado por $|\Delta| - 1$ e têm a seguinte relação de dispersão

$$E_m(k) = -J(\Delta + \cos k), \quad (1.16)$$

a partir da qual obtemos a velocidade máxima dos mágnons dada por

$$v_m = \max \left\{ \left| \frac{dE_m}{dk} \right| \right\} = J. \quad (1.17)$$

Esses tipos de excitações foram observadas no nosso trabalho, que será discutido com mais detalhes no próximo capítulo.

2 Cone de Luz de spinons e estados ligados em uma cadeia de Heisenberg XXZ

Neste capítulo vamos apresentar o nosso estudo sobre dinâmica de não equilíbrio gerado por um *quench* local em uma cadeia XXZ. Mais especificamente, nós conectamos duas cadeias em fases diferentes – uma na fase com ordenamento ferromagnético e a outra na fase sem ordenamento magnético – e estudamos a evolução temporal da magnetização por sítio e da entropia de emaranhamento entre duas partições via a técnica numérica t-DMRG [7].

Nós mostramos que a propagação da informação para toda fase LL apresenta um cone de luz, em ambas quantidades em que estamos interessados, cuja velocidade corresponde à máxima velocidade das excitações conhecidas como spinons. Ainda na fase LL , há uma região de parâmetros (o parâmetro de anisotropia se aproximando do ponto de transição para a fase ferromagnética) em que existem excitações do tipo estados ligados [70], que se propagam mais rápido do que os spinons e criam um segundo cone de luz com velocidade maior. Os estados ligados que observamos surgem no subespaço de magnetização nula, diferentemente dos observados na Ref. [47], os quais apresentam velocidades menores do que do spinons. As velocidades dos cones de luz tanto para os spinons quanto para os estados ligados, obtidas numericamente por nós, estão em boa concordância com os valores de velocidades de tais excitações obtidas exatamente via *ansatz* de Bethe, demonstrando que essa propriedade da dispersão das excitações se manifesta na dinâmica fora do equilíbrio.

Além da dinâmica, outro ponto que analisamos foi o estado assintótico do sistema, fazendo uma comparação com o estado de equilíbrio, que é definido como o estado fundamental das duas cadeias conectadas. Calculamos a distância relativa da magnetização por sítio entre os dois estados e observamos que o sistema alcança o estado de equilíbrio de forma não homogênea, da interface para a borda. À medida que aumentamos o tamanho do sistema a distância relativa para o estado de equilíbrio diminui; acreditamos que somente no limite termodinâmico o sistema como um todo atinge o estado de equilíbrio, como esperado para um *quench* local.

Este trabalho foi desenvolvido em parceria com a então aluna Helena de Souza Bragança, do nosso grupo de pesquisa, e com o professor Rodrigo G. Pereira, do Instituto Internacional de Física. O trabalho foi publicado na revista *Physical Review B* [61] no início do ano de 2017. O código do t-DMRG que utilizamos foi desenvolvido em conjunto pelo Dr. Eduardo Mascarenhas, colaborador do nosso grupo, e por Helena Bragança.

2.1 Protocolo de *quench* e quantidades observadas

No capítulo 1, demos uma visão geral sobre o sistema que tratamos e apresentamos alguns resultados da literatura relacionados aos nossos estudos. Como dissemos, estamos interessados em estudar a dinâmica de não-equilíbrio gerada por um *quench* local em uma cadeia XXZ. Nesta seção especificamos qual é o *quench* que realizamos e quais são as quantidades que analisamos.

Neste trabalho nós consideramos o seguinte protocolo de *quench* (veja Figura 10): duas cadeias finitas com diferentes parâmetros Δ estão inicialmente separadas e são preparadas nos estados fundamentais de seus respectivos hamiltonianos, denotados por $|G_L\rangle$ e $|G_R\rangle$ para as cadeias da esquerda e da direita, respectivamente. No tempo $t = 0$, as cadeias são conectadas e deixamos o sistema evoluir. O hamiltoniano global do sistema é dado por

$$H(t) = H_L + \Theta(t) \left(S_k^X S_{k+1}^X + S_k^Y S_{k+1}^Y + \delta S_k^Z S_{k+1}^Z \right) + H_R, \quad (2.1)$$

onde

$$\Theta(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } t < 0, \\ 1, & \text{se } t \geq 0. \end{cases} \quad (2.2)$$

H_L e H_R são os hamiltonianos da cadeia da esquerda e da direita, respectivamente. Eles apresentam a mesma estrutura da equação (1.6), sendo que para H_L o somatório é realizado no intervalo $i = \{1, 2, \dots, k-1\}$ e para H_R o somatório é sobre $i = \{k+1, k+2, \dots, N-1\}$. Portanto, o índice k tem o papel de rotular qual o último sítio da cadeia da esquerda antes da interface. O valor da constante de acoplamento na junção entre as cadeias é escolhido como $J = 1$, enquanto que a constante de anisotropia nesse ponto, δ , é livre para assumir qualquer valor. Definido o hamiltoniano dessa forma, agora temos três parâmetros livres: $\Delta_{L(R)}$, que define em qual fase a cadeia da esquerda (direita) está (veja diagrama de fases da Figura 8), e δ , que, na linguagem de férmions sem spin, está associado com a interação entre as partículas, podendo ser interpretado como a quantidade que define a força de interação entre as duas cadeias.

Observe que o simples fato de juntarmos as duas cadeias já produz uma dinâmica de não-equilíbrio, uma vez que o estado inicial, que pode ser escrito como $|\Psi(0)\rangle = |G_L\rangle \otimes |G_R\rangle$, não é mais um autoestado do novo hamiltoniano $H(t)$, justamente devido ao termo de junção, veja a equação 2.1.

Quenches locais envolvendo a junção de duas cadeias finitas de mesmo tamanho têm sido explorados na literatura, em muitos casos [76–79] tem-se analisado a evolução temporal da entropia de emaranhamento entre as duas metades depois de se conectar cadeias que estão na mesma fase. Para entender melhor a entropia de emaranhamento, considere a cadeia representada na Figura 11.

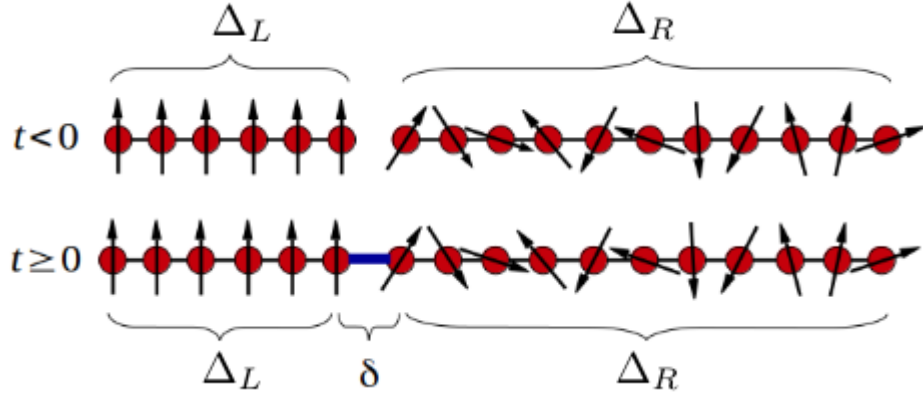


Figura 10 – Representação do nosso protocolo de *quench*: para $t < 0$ as cadeias estão separadas e em seus respectivos estados fundamentais; em $t = 0$ elas são conectadas. A cadeia da esquerda está na fase ferromagnética enquanto que a da direita está na fase *LL*.

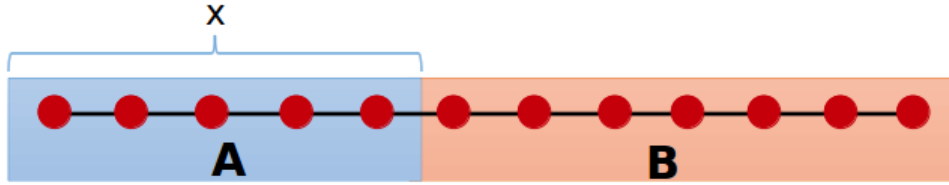


Figura 11 – Representação de uma cadeia separada em duas partes complementares A e B . A partição A tem tamanho x .

Podemos separar a cadeia em duas partes: uma parte A de tamanho x e sua parte complementar B . A entropia de von Neumann de cada partição é definida como

$$S_\nu = -\rho_\nu \ln \rho_\nu, \quad (2.3)$$

onde ρ_ν , com $\nu = A, B$, é o estado reduzido da partição ν , por exemplo, $\rho_A = \text{tr}_B\{\rho\}$, sendo ρ o estado global da cadeia. Se o estado global do sistema for puro, a entropia de von Neumann é um bom quantificador de emaranhamento; nessa situação ela é conhecida com entropia de emaranhamento. Esse é o nosso caso, pois, como trabalhamos com um sistema isolado e começamos com um estado puro, temos que o estado global continua sendo puro para todo tempo t .

Considere uma cadeia que pode ser separada em duas partes como mostra a Figura 11. Podemos escrever o estado global do sistema $|\Psi\rangle$ usando a decomposição de Schmidt [80], isto é, $|\Psi\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle |b_i\rangle$, sendo $|a_i\rangle$ e $|b_i\rangle$ autoestados ortonormais das partições A e B , respectivamente. Portanto, o estado reduzido da partição A , por exemplo, é

$$\rho_A = \text{tr}_B\{|\Psi\rangle\langle\Psi|\} = \text{tr}_B\left\{\sum_{i,i'} c_i c_{i'}^* |a_i\rangle |b_i\rangle \langle a_{i'}| \langle b_{i'}|\right\} = \sum_i |c_i|^2 |a_i\rangle \langle a_i|, \quad (2.4)$$

onde $|c_i|^2$ são os autovalores de ρ_A e é fácil ver que são os mesmos para ρ_B . Substituindo

na equação 2.3, a entropia de emaranhamento pode ser escrita como

$$S(x, t) = - \sum_i \lambda_i(x, t) \ln \lambda_i(x, t), \quad (2.5)$$

onde $\lambda_i(x, t) = |c_i|^2$ são os autovalores da matriz densidade reduzida, $\rho_A = \rho(x, t)$, associada com a partição de tamanho $1 \leq x < N$ no tempo t , veja a Figura 11. A ideia é que podemos variar o tamanho da partição, variando x , de modo que podemos acompanhar a evolução da entropia ao longo da cadeia.

Como dissemos, geralmente se realiza um *quench* no meio de uma cadeia e investiga-se a evolução temporal da entropia de emaranhamento entre essas duas partições, sendo que essas duas metades de cadeia estão na mesma fase: logo esse *quench* desempenha o papel de um defeito. Em nosso trabalho nós conectamos duas cadeias em fases distintas, como mostra a Figura 10, com o objetivo de investigar como a fase de uma cadeia pode afetar as propriedades da outra. Uma pergunta que surge é: o que acontece se conectamos uma cadeia com ordenamento magnético, por exemplo uma cadeia na fase ferromagnética, com uma cadeia sem ordenamento magnético, por exemplo uma cadeia na fase Líquido de Luttinger? A fase ferromagnética consegue induzir magnetização na fase *LL*? Pensando do ponto de vista de férmions, essa cadeia na fase ferromagnética está cheia de partículas e a na fase *LL* tem buracos, essas partículas se movem entre essas duas cadeias após o *quench*?

Pensando nessas questões, nós estudamos as mudanças produzidas pelo *quench* sobre a magnetização por sítio

$$\langle S_i^z(t) \rangle = \langle \Psi(t) | S_i^z | \Psi(t) \rangle \quad (2.6)$$

e a entropia de emaranhamento entre duas partes complementares, dada na equação 2.5.

A fim de estudar a dinâmica do sistema, escolhemos a cadeia da esquerda fixa na fase ferromagnética, $\Delta_L \leq -1$, enquanto que a cadeia da direita está na fase *LL*, $-1 < \Delta_R \leq 1$. Dada essa escolha das fases, temos que o estado fundamental da cadeia da esquerda apresenta uma magnetização bem definida com todos os spins alinhados na mesma direção; quebramos a degenerescência do estado fundamental aplicando um campo da ordem de 10^{-4} ao longo do eixo $-z$ no primeiro sítio da cadeia. Dessa forma, escolhemos o estado em que todos os spins têm projeção *up* na direção $-z$. Já o estado fundamental da cadeia da direita, $|G_R(\Delta_R)\rangle$, não apresenta ordem magnética, porém depende do parâmetro Δ_R . Portanto, o estado inicial global do sistema, para essa escolha de parâmetros, pode ser escrito como

$$|\Psi(0)\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle \otimes |G_R(\Delta_R)\rangle. \quad (2.7)$$

A Figura 10 resume o nosso protocolo de *quench*. Em $t < 0$ as cadeias estão separadas e em $t = 0$ as cadeias são conectadas. Como definimos a constante de acoplamento

$J = 1$ para as duas cadeias e também no ponto de junção, temos que os únicos parâmetros livres são $\Delta_{L(R)}$ e δ , sendo os dois primeiros os responsáveis por distinguir as fases das duas cadeias. A cadeia da esquerda apresenta a configuração real dos spins no estado fundamental, enquanto que na cadeia da direita temos uma representação pictórica de um estado sem ordem magnética. Na maior parte dos nossos resultados o sistema como um todo tem $N = 80$ sítios. Escolhemos $k = N/4$; isso significa que a cadeia da esquerda tem $N_L = 20$ sítios, enquanto que a da direita tem $N_R = 60$ sítios.

2.2 Efeito cone de luz

Acabamos de definir o nosso estado inicial e como o *quench* é realizado; nesta seção discutiremos o efeito do *quench* na dinâmica da magnetização e da entropia de emaranhamento das cadeias. Todos os nossos resultados de evolução temporal foram obtidos através da técnica numérica t-DMRG, extensão temporal do DMRG. Uma vez que o espaço de Hilbert cresce exponencialmente com o tamanho do sistema, ou seja, com d^N , sendo d a dimensão local do sítio, é muito difícil simular exatamente sistemas com muitos sítios. Portanto, o DMRG se baseia na truncagem do espaço de Hilbert e consegue descrever o estado fundamental de sistemas em $1D$ com alta precisão. Essas técnicas estão discutidas com mais detalhes no apêndice B.

Ao conectarmos as duas cadeias, retiramos localmente o sistema do equilíbrio; a informação dessa mudança local no hamiltoniano começa então a se propagar da interface entre as cadeias para suas extremidades. Após o *quench*, à medida que o sistema evolui, mudanças na magnetização e na entropia de emaranhamento fluem ao longo das cadeias formando um cone de luz efetivo. Através do cone de luz, conseguimos obter a velocidade da frente de onda das perturbações geradas tanto na magnetização quanto na entropia de emaranhamento.

A Figura 12 apresenta um mapa de cores para a magnetização, que mostra que a perturbação gerada pelo *quench* se propaga em ambas as cadeias. As cores indicam o valor da magnetização e os eixos referem-se aos sítios da cadeia e ao tempo. A cadeia da esquerda está na fase ferromagnética, já a da direita está na fase Líquido de Luttinger (LL). Nos três gráficos mantivemos fixo $\Delta_R = 0.5$ e fizemos $\Delta_L = -1.1; -1.5; -2.0$, no primeiro, segundo e terceiro gráfico, respectivamente, sendo ordenado de cima para baixo. Note que há a formação de dois cones de luz não simétricos, com velocidade na cadeia da esquerda diferente da velocidade na cadeia da direita. A velocidade é obtida pelo inverso da inclinação associada ao cone de luz. Como as inclinações são diferentes, temos velocidades diferentes. Discutiremos em breve que essa velocidade de propagação depende exclusivamente dos parâmetros do *bulk* da cadeia.

Analisando primeiramente a cadeia da esquerda, vemos que todos os spins inicial-

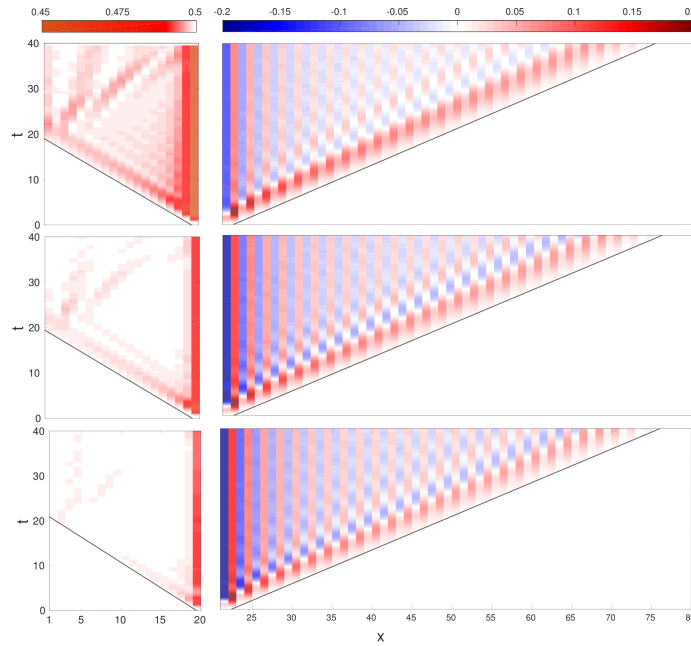


Figura 12 – Mapa de cor da magnetização como função do tempo, t , e do sítio, x , das cadeias da esquerda e da direita (colunas da esquerda e da direita, respectivamente). Os valores da anisotropia para a cadeia da esquerda são $\Delta_L = \{-1.1, -1.5, -2.0\}$ (de cima para baixo), enquanto que para a cadeia da direita fixamos $\Delta_R = 0.5$. No ponto da junção fizemos $\delta = \Delta_R$. Há a formação de dois cones de luz não simétricos, limitados pela velocidade máxima dos mágnons à esquerda e pela velocidade máxima dos spinons à direita.

mente estão polarizados, implicando em $\langle S_i^z \rangle = 0.5$, e, ao conectarmos as cadeias, há uma pequena alteração da magnetização dos sítios durante a evolução temporal. Esse desvio da magnetização em relação ao valor do estado inicial diminui com Δ_L “caminhando” cada vez mais para dentro da fase ferromagnética. Compare os três gráficos da esquerda da Figura 12 e observe que, à medida que Δ_L diminui, o desvio da magnetização, dado pela cor vermelha, é cada vez menor. Esse efeito está associado com o *gap* dos mágnons (dado por $|\Delta_L| - 1$): para que a perturbação se propague na cadeia da esquerda, ela tem que ter energia suficiente para vencer o *gap*; quanto maior $|\Delta_L|$ maior o *gap*, e, portanto, mais difícil se torna a propagação da perturbação. A inclinação do cone de luz desses três gráficos é a mesma para a cadeia da esquerda, isso significa que a velocidade é a mesma nestes casos e independente de Δ_L . A frente de onda dessa perturbação se propaga com a velocidade máxima dos mágnons, $v_m = J$, que independe da anisotropia. Ou seja, nossos resultados indicam que, uma vez vencido o *gap*, a perturbação se propaga com a mesma velocidade das excitações de baixa energia da fase ferromagnética.

Para $\Delta_L \ll -1$, a perturbação criada pelo *quench* penetra pouco na fase ferromagnética. Isso pode ser facilmente entendido na linguagem de férmions sem spins. O estado inicial da cadeia da esquerda é totalmente ocupado (lembre-se que spin *up* corresponde a estado ocupado) e a interação entre as partículas desse lado da cadeia é atrativa, pois

$\Delta_L \leq -1$. Embora haja buracos na cadeia da direita, que está em semi-preenchimento, a interação atrativa entre os férmions da cadeia da esquerda impede os buracos de se moverem para a cadeia da direita. Quanto maior essa interação atrativa, menos suscetível a mudanças fica a cadeia da esquerda.

Analisando a cadeia da direita (coluna da direita da Figura 12), percebemos que a velocidade do cone de luz nessa parte da cadeia não depende dos parâmetros da cadeia da esquerda, isto é, independe de Δ_L , mas somente dos parâmetros da própria cadeia, ou seja, de Δ_R . Com isso em mente, fixamos, por simplicidade, a cadeia da esquerda “profundamente” na fase ferromagnética tomando $\Delta_L = -20$ e fomos variando a cadeia da direita dentro da fase LL . Para cada valor de Δ_R , observamos a evolução temporal da magnetização e da entropia de emaranhamento ao longo da cadeia.

Nossos resultados principais estão resumidos na Figura 13. Os círculos e os quadrados são, respectivamente, a velocidade da frente de onda da magnetização e da entropia de emaranhamento obtidas dos cones de luz observados em nossas simulações (que serão discutidas nas próximas seções). A curva pontilhada corresponde à velocidade máxima dos spinons, prevista pelo *ansatz* de Bethe (equação 1.11), enquanto que a linha contínua corresponde à velocidade máxima dos estados ligados, calculada pela equação A.7. Como discutimos na seção 1.4, sabemos que para $\Delta < \Delta^*$ os estados ligados apresentam velocidade máxima maior do que os spinons. Podemos então ver que, para $\Delta^* < \Delta_R < 0$, os estados ligados e os spinons têm a mesma velocidade máxima; porém, para $\Delta_R < \Delta^*$, a velocidade máxima dos estados ligados se torna maior do que a dos spinons, logo as curvas de velocidades se separam.

As velocidades obtidas por nossos cálculos numéricos estão em boa concordância com as velocidades dos spinons e com as dos estados ligados. Isso sugere que ao realizar um *quench* local geramos essas excitações no sistema e são as velocidades de propagação dessas excitações que define as bordas dos cones de luz.

Na próxima seção iremos discutir esses resultados em detalhes, mostraremos o surgimento do cone de luz e como fizemos para obter sua velocidade. Vamos mostrar que, para $\Delta^* \lesssim \Delta_R < 1$, o cone de luz é definido pela velocidade máxima dos spinons v_s (que a partir de agora será chamado de cone de luz dos spinons). Por outro lado, para $-1 < \Delta_R \lesssim \Delta^*$, mudanças na magnetização e na entropia de emaranhamento podem se propagar com velocidade maior do que v_s , devido à presença de excitações do tipo estado ligado. Nesse regime de parâmetros, nós observamos um segundo cone de luz, chamado cone de luz dos estados ligados, fora do cone de luz dos spinons.

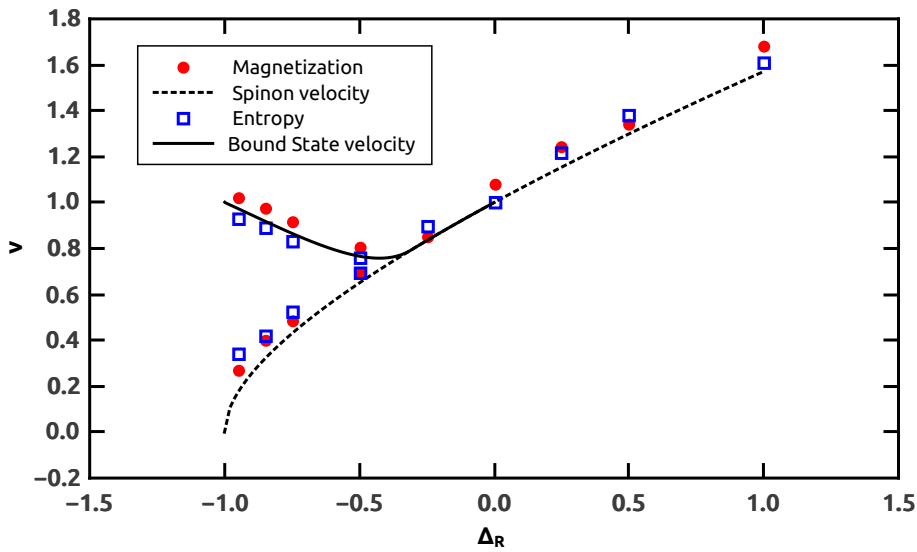


Figura 13 – Velocidade da frente de onda da magnetização (círculos) e da entropia de emaranhamento (quadrados) em função da anisotropia da cadeia da direita, obtida via simulação numérica. A linha tracejada é a velocidade máxima das excitações do tipo spinons, obtida exatamente pela equação 1.11, e a curva sólida é a velocidade máxima das excitações do tipo estado ligado, obtida exatamente pela equação A.7.

2.3 Cone de luz dos spinons

O estado fundamental da fase LL tem como característica a ausência de magnetização, ou seja, os spins não apresentam uma orientação bem definida. No momento em que essa cadeia é conectada com a que está na fase ferromagnética, os spins mais próximos da borda começam a apresentar uma magnetização não nula. A cadeia da esquerda exerce o papel semelhante ao de um campo magnético, forçando os spins da interface a assumirem alguma direção, enquanto que δ (acoplamento entre as cadeias na direção z) define o acoplamento do spin da cadeia da direita com esse campo. O sinal de δ determina qual orientação o primeiro spin da cadeia da direita vai assumir. Se $\delta > 0$, o sítio da cadeia da direita que está na interface tem uma magnetização de sinal oposto ao último sítio da cadeia da esquerda. Como a cadeia da esquerda tem magnetização positiva, para esse caso, o primeiro sítio da direita terá magnetização negativa. Se $\delta < 0$, os sítios que estão na interface tem o mesmo sinal de magnetização. Uma vez definida a magnetização do primeiro sítio, esse induz magnetização no seu sítio vizinho e esse efeito continua pela cadeia. Essa mudança na magnetização da cadeia da direita vai se propagando como uma onda com velocidade bem definida, que depende somente dos parâmetros da cadeia da direita. A amplitude de δ não interfere na velocidade da frente de onda; portanto, por simplicidade, fizemos $\delta = \Delta_R$ para todos os casos que analisamos. A Figura 14 ilustra essa dinâmica na magnetização dos sítios da cadeia da direita com $\Delta_R = 0.5$. Esse mesmo

efeito é observado para outros valores de $\Delta_R > 0$ dentro da fase LL .

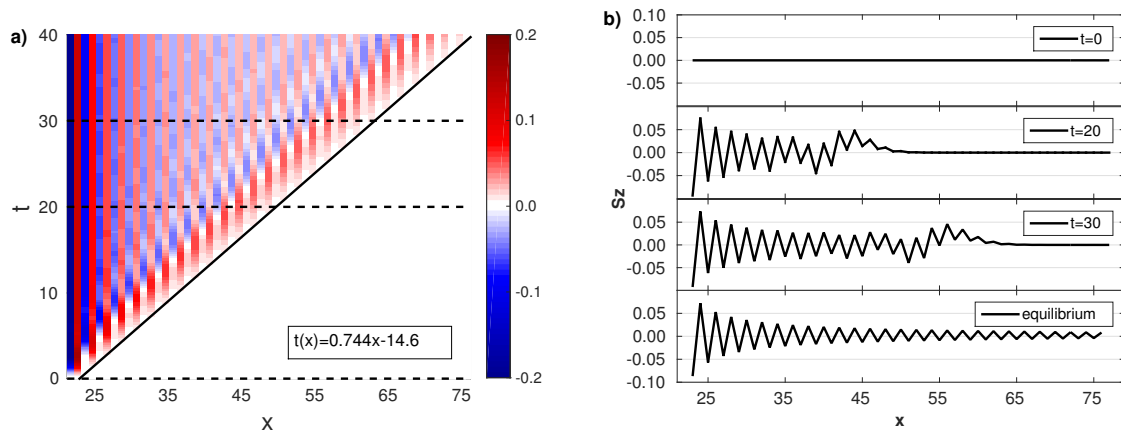


Figura 14 – **a)** Mapa de cores da magnetização da cadeia da direita quando $\Delta_R = 0.5$. A linha tracejada indica cortes no tempo, enquanto que a linha sólida corresponde a um ajuste linear da frente de onda. **b)** Perfil de magnetização da cadeia da direita para tempos fixos indicados pelos cortes na figura a). O último gráfico corresponde ao estado de equilíbrio.

O painel (a) da Figura 14 apresenta o mapa de cores da magnetização como função da posição e do tempo; claramente podemos ver que o fluxo de magnetização é limitado, definindo assim, um cone de luz. A linha sólida é um ajuste linear da frente de onda da magnetização. Para obtê-la, fixamos um sítio e marcamos o instante de tempo em que a magnetização é $0.01\langle S_{max}^z \rangle$, onde $\langle S_{max}^z \rangle$ é a amplitude máxima da magnetização assumida pelos spins da cadeia da direita. O inverso da inclinação dessa reta nos fornece a velocidade da frente de onda, que está representada pelos círculos na Figura 13. De acordo com a comparação apresentada na Figura 13, a velocidade de propagação corresponde à velocidade máxima dos spinons.

A frente do pulso tem uma magnetização positiva; porém, para sítios que estão longe da borda do cone de luz, o sinal da magnetização varia entre sítios pares e ímpares. Uma vez definida a magnetização do sítio da interface, os demais sítios apresentam uma magnetização alternada de acordo com seus índices, isto é, se o primeiro sítio tem magnetização positiva, o segundo terá magnetização negativa, e assim por diante. A mesma ideia é válida para o caso contrário. Isso pode ser explicado da seguinte forma: a magnetização total $S_T^z = \sum_i S_i^z$ deve se conservar, uma vez que $[H, S_T^z] = 0$; como a cadeia da esquerda é muito estável, sua magnetização praticamente não muda, portanto praticamente não há fluxo de magnetização entre as cadeias. Como a magnetização do primeiro sítio da cadeia da direita mudou, os demais sítios devem alterar sua orientação para manter a magnetização total da cadeia nula. Na linguagem de férmions sem spin, dizemos que o *quench* não cria partículas e nem há transporte de partículas entre as cadeias, havendo somente uma redistribuição das partículas da cadeia da direita, que ainda

é mantida em semi-preenchimento.

O gráfico da direita da Figura 14 apresenta cortes do mapa de cores em diferentes instantes de tempo. Esses cortes fornecem o perfil de magnetização da cadeia da direita em tempos distintos. Inicialmente, não há magnetização na cadeia da direita; ao evoluir, os sítios passam a assumir magnetização diferente de zero. Conseguimos ver a propagação do pulso e o perfil dos spins na borda e dentro do cone de luz. O último gráfico representa o perfil de magnetização da cadeia no equilíbrio. A situação de equilíbrio a que estamos nos referindo é o estado fundamental do hamiltoniano (equação 2.1) considerando $\Theta(t) = \Theta = 1$, ou seja, o estado fundamental das duas cadeias ligadas. Observe que o perfil da magnetização da cadeia para tempos longos se aproxima do que é observado no estado de equilíbrio; discutiremos em outra seção a questão de como o sistema se aproxima do equilíbrio.

A entropia de emaranhamento do estado fundamental na fase LL para uma cadeia finita é dada por [81, 82]

$$S(x) = \frac{1}{6} \ln \left| \frac{2L}{\pi} \sin \left(\frac{\pi x}{L} \right) \right| + \frac{(-1)^x c_1}{\left[\frac{L}{\pi} \sin \left(\frac{\pi x}{L} \right) \right]^K} + c_2, \quad (2.8)$$

onde x é o tamanho da partição e $K = \pi / (2(\pi - \arccos \Delta))$ é um dos parâmetros de Luttinger¹ e c_1 e c_2 são constantes não universais; note que há uma oscilação da entropia que depende do sítio. Temos então que o estado fundamental, diferente do que é observado para a magnetização, apresenta entropia de emaranhamento diferente de zero.

A Figura 15 apresenta a entropia de emaranhamento para a cadeia da direita com $\Delta_R = 0.5$ em função do tamanho da partição para o estado fundamental, curva preta, e para o tempo $t = 40$ após o *quench*. A curva preta corresponde ao resultado da equação 2.8; observe a presença do comportamento oscilatório como função do tamanho da partição x . Vemos também que o *quench* altera a entropia ao longo da cadeia. Como o estado fundamental apresenta um valor não nulo, para conseguir ver como a entropia de emaranhamento mudou com a realização do *quench* em relação ao estado inicial consideramos a diferença de entropia, isto é, $\Delta S(x, t) = S(x, t) - S(x, 0)$. Vale ressaltar que, como a cadeia da esquerda está profundamente na fase ferromagnética, seu estado fundamental tem entropia de emaranhamento nula, basta ver o estado definido pela equação 2.7. Além disso já discutimos que esse *quench* não altera o estado dessa parte da cadeia. Portanto a entropia de emaranhamento para a cadeia da esquerda sempre permanece nula, por isso não a mostramos nos nossos gráficos.

O painel (a) da Figura 16 apresenta um mapa de cores de ΔS para a cadeia da

¹ A teoria Líquido de Luttinger descreve a física de baixas energias de sistemas em uma dimensão sem *gap* por meio de dois parâmetros K e u , sendo o primeiro adimensional e o segundo com dimensão de velocidade.

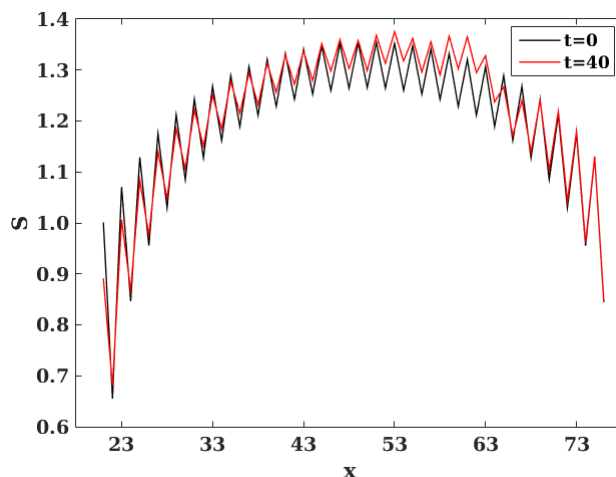


Figura 15 – Entropia de emaranhamento em função da partição de tamanho x ao longo da cadeia da direita com $\Delta_R = 0.5$ para o estado inicial, curva preta, e para o tempo $t = 40$, curva vermelha.

direita com $\Delta_R = 0.5$. Assim como no caso da magnetização, a variação na entropia de emaranhamento se propaga seguindo um cone de luz. De fato, posteriormente ao nosso artigo sobre este trabalho, foi mostrado analiticamente que para perturbações locais a dinâmica da entropia deve obedecer um cone de luz [83]. Inicialmente a entropia aumenta com a passagem do pulso; logo após a passagem do pulso ela diminui. Note que a diferença da entropia é pequena (da ordem de 10^{-2}); isso significa que o *quench* produz uma pequena variação nessa quantidade. De forma análoga ao que foi feito para magnetização, conseguimos definir a borda do cone de luz e conseqüentemente calcular a sua velocidade. É interessante notar que a mudança na entropia e a mudança na magnetização se propagam com a velocidade máxima dos spinons, como apresentado na Figura 13.

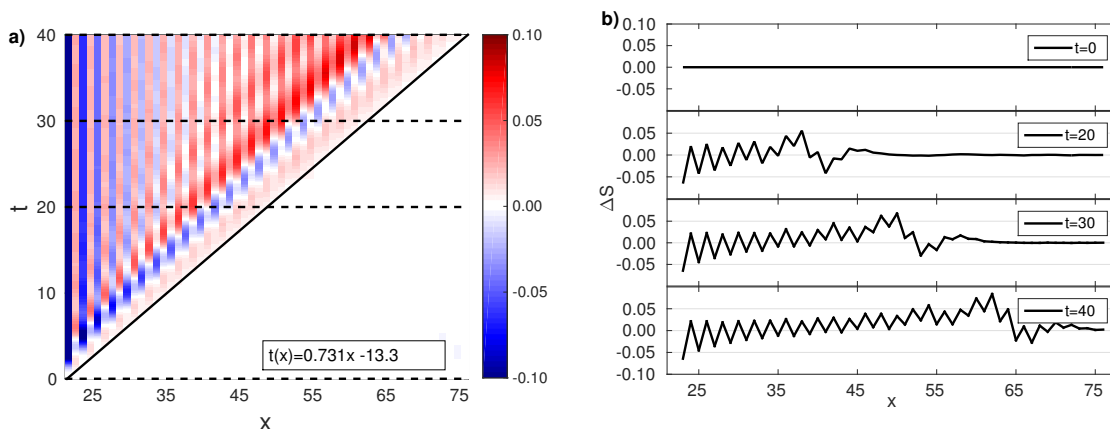


Figura 16 – **a)** Mapa de cores da diferença da entropia para a cadeia da direita quando $\Delta_R = 0.5$. As linhas tracejadas indicam cortes no tempo que são apresentados no painel **b)**, enquanto a linha sólida corresponde a um ajuste linear da frente de onda. **b)** Perfil de ΔS na cadeia da direita para os tempos $t = 0$, $t = 20$, $t = 30$ e $t = 40$.

O painel (b) da Figura 16 apresenta os cortes de $\Delta S(x, t)$ para instantes de tempos fixos, representados pelas linhas tracejadas no painel (a), a partir dos quais podemos acompanhar a perturbação gerada pelo *quench* ao longo da cadeia da direita. Próximo à frente de onda, há um aumento da entropia, seguido por uma diminuição da mesma. Dentro do cone de luz, a entropia apresenta oscilações dependentes do sítio, similar ao caso da magnetização. No entanto, aqui o mecanismo é diferente: as oscilações já existem no estado inicial (veja a equação 2.8). O efeito do *quench* é diminuir a amplitude dessas oscilações, conforme mostrado na Figura 15. Podemos entender essa diminuição da amplitude da seguinte forma: o estado inicial apresenta magnetização por sítio nula, veja a Figura 14, portanto ele é uma superposição linear de estados com magnetização definida, fazendo com que o estado reduzido tenha um alto grau de mistura. Após o *quench*, os sítios passam a ter um certo ordenamento magnético, o que faz com que alguns estados da superposição tenham mais pesos do que outros, diminuindo dessa forma o grau de mistura do estado reduzido, como observado na Figura 16.

Diferentemente do que foi feito na referência [84], onde os autores olharam para a entropia de emaranhamento na interface e então inferiram como ela se propaga por toda a cadeia, nós mapeamos a propagação dos pulsos de magnetização e de entropia por toda a cadeia, como nas Figuras 14 e 16, e concluímos que a frente desses pulsos se propaga linearmente com o tempo, ou seja, $x \propto t$. Conseguimos, dessa forma, calcular a velocidade de propagação da frente de onda.

Fizemos essa mesma análise para a cadeia da direita em outros pontos dentro da fase LL e observamos a formação do cone de luz dos spinons tanto na dinâmica da magnetização quanto na variação da entropia de emaranhamento. A partir dos cones de luz, definimos a velocidade máxima de propagação dessas quantidades, como mostrado no gráfico da Figura 13. Os círculos são as velocidades obtidas para a magnetização e os quadrado as velocidades para a variação da entropia de emaranhamento.

Para $\Delta^* < \Delta < 1$ observamos apenas um cone de luz; no entanto, para $\Delta < \Delta^*$, nós conseguimos definir um segundo cone de luz, associado a outro tipo de excitação, conforme discutido em detalhes na próxima seção.

2.4 Cone de luz dos estados ligados

Vamos agora analisar a dinâmica da magnetização e da entropia de emaranhamento para a região de parâmetros onde é prevista pela solução do modelo XXZ a existência de outro tipo de excitação, denominada estado ligado. Mais especificamente estamos interessados na região em que os estados ligados conseguem se propagar mais rápido do que os spinons, ou seja, vamos investigar o que ocorre em $\Delta < \Delta^*$.

O painel (a) da Figura 17 apresenta a magnetização na cadeia da direita em função

do tempo e dos sítios para $\Delta_R = -0.75$. Os cortes indicando o perfil de magnetização para tempos fixos estão apresentados no painel (b) da Figura 17. Podemos perceber dois regimes distintos: o primeiro é uma região formando um largo pacote de magnetização negativa e o segundo é uma região de magnetização alternada, para valores de x maiores que os correspondentes ao grande pulso de magnetização negativa. Podemos definir a frente de onda da primeira região da seguinte forma: primeiro conseguimos definir para um certo instante de tempo t qual o sítio i em que a magnetização tem um valor mínimo, a partir desse ponto procuramos o sítio em que a magnetização se torna positiva. Este ponto é o que definimos como a frente desse grande pacote de magnetização negativa.

Calculando a velocidade associada à frente de onda do pulso largo com magnetização negativa e incluindo-a no gráfico da Figura 13, observamos que ela coincide com a velocidade dos spinons v_s , e portanto a posição dessa frente de onda em função do tempo define o cone de luz dos spinons, indicado pela linha sólida no painel (a). Como as oscilações aparecem antes (no tempo) do pulso largo, para obter a velocidade de propagação apresentada na Figura 13, consideramos somente tempos longos, pois dessa maneira asseguramos que o pulso já foi formado. Analisando a frente de onda dessas oscilações presentes na segunda região, nós concluímos que sua posição em função do tempo também pode ser ajustada a uma reta, de forma análoga ao caso de $\Delta = 0.5$, definindo assim um segundo cone de luz (indicado pela linha tracejada no mapa de cores da Figura 17). É interessante observar que a velocidade associada a essa frente de onda (ilustrada pelos círculos na Figura 13) corresponde à velocidade máxima v_b dos estados ligados, sugerindo que essas oscilações na magnetização sejam assinaturas dos estados ligados.

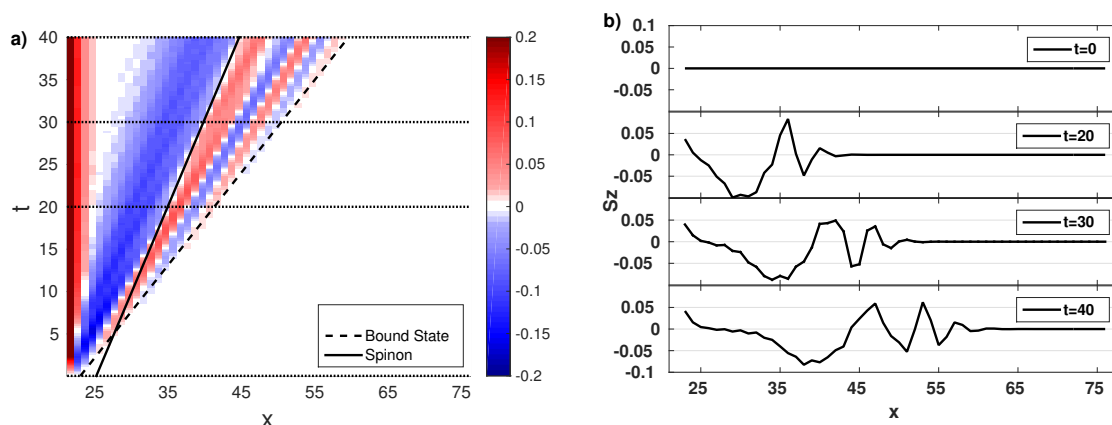


Figura 17 – **a)** Evolução temporal da magnetização na cadeia da direita quando $\Delta_R = -0.75$. As linhas pontilhadas na horizontal indicam cortes para tempos fixos, enquanto que a linha sólida e tracejada delimitam os cones de luz dos spinons e dos estados ligados. **b)** Perfil de magnetização da cadeia da direita nos tempos indicados pelas linhas pontilhadas no painel (a).

Semelhante ao que fizemos para $\Delta_R = 0.5$ fizemos um gráfico da entropia de emaranhamento para a cadeia da direita com $\Delta_R = -0.75$ em dois tempos distintos:

$t = 0$, curva preta, e $t = 40$, curva vermelha, apresentadas na Figura 18. Observe que, diferentemente do caso anterior, não conseguimos notar oscilações dependentes do sítio. Isto ocorre porque, para esse valor de anisotropia, o segundo termo da equação 2.8 tem uma contribuição muito pequena comparado ao primeiro termo. Mesmo com essa diferença em relação ao caso anterior, analisamos a seguir a diferença de entropia antes e após o *quench*, para estudar seu efeito no sistema.

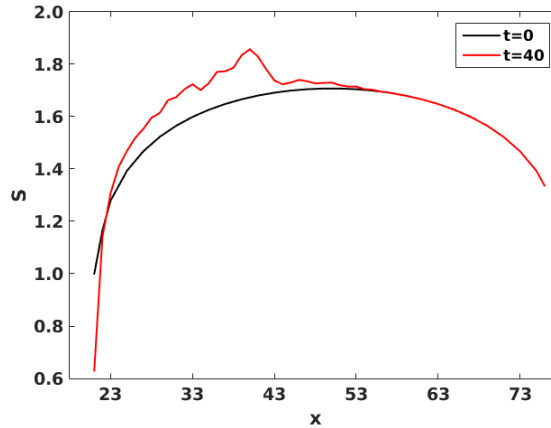


Figura 18 – Entropia de emaranhamento em função da partição de tamanho x ao longo da cadeia da direita com $\Delta_R = -0.75$ para o estado inicial, curva preta, e para o tempo $t = 40$, curva vermelha.

A estrutura de dois cones de luz observada para a magnetização também aparece para a entropia de emaranhamento. A Figura 19 apresenta a diferença de entropia em relação ao estado inicial, $\Delta S(x, t)$, para $\Delta_R = -0.75$. No painel (a) apresentamos o mapa de cores e no painel (b) nós mostramos os cortes para tempos fixos indicados pelas linhas pontilhadas em (a). De forma análoga à propagação da magnetização, nós podemos reconhecer duas regiões: uma região em que há uma grande variação da entropia e outra com um pequeno aumento na entropia. Podemos definir a frente da primeira região da seguinte forma: para um tempo fixo t , encontramos o sítio onde há a maior variação de entropia; a partir dele essa variação começa a diminuir, no entanto existe um ponto onde ela volta a aumentar; esse ponto é o que definimos como a frente dessa região. Já a segunda região é definida de forma análoga ao que foi feito para $\Delta_R = 0.5$. Para ilustrar, vamos olhar para o tempo fixo $t = 20$ na figura (b): a primeira região se estende da interface até $x \approx 34$ e a segunda região está compreendida entre $34 < x < 38$.

Definidas as frentes das duas regiões, podemos calcular a velocidade com que elas se propagam. De acordo com a nossa análise, a frente de onda da primeira região se propaga com velocidade v_s , enquanto que a segunda se propaga com velocidade v_b . De fato, no painel (a), podemos identificar claramente dois cones de luz, um relacionado com os spinons (curva sólida) e outro relacionado com os estados ligados (curva tracejada). Como observado para a magnetização, as velocidades de propagação obtidas para a diferença de

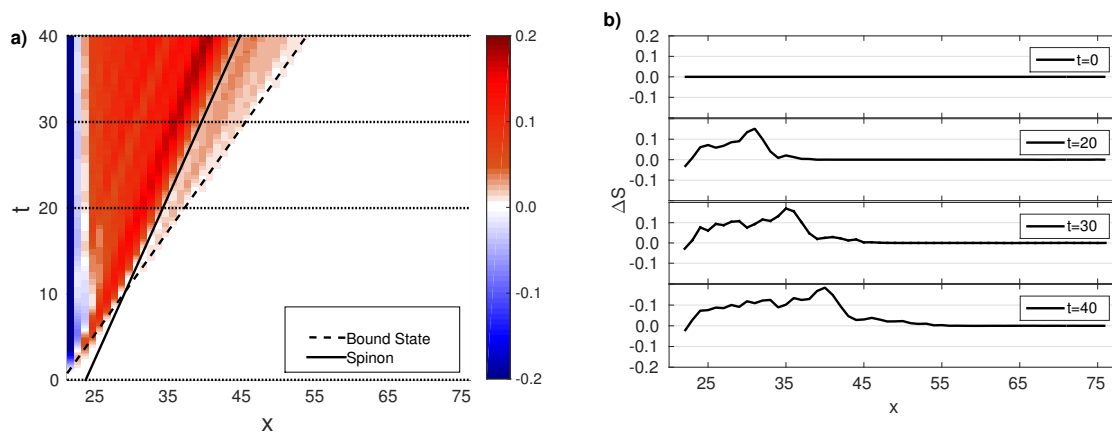


Figura 19 – **a)** $\Delta S(x, t)$ em função do tempo e da posição na cadeia da direita quando $\Delta_R = -0.75$. As linhas pontilhadas na horizontal indicam cortes no tempo ilustrados na figura **b)**. A linha sólida sinaliza o cone de luz associado aos spinons, enquanto que a linha tracejada indica o cone de luz dos estados ligados. **b)** Perfil de $\Delta S(x, t)$ na cadeia da direita em diferentes instantes de tempo.

entropia, representadas pelos quadrados na Figura 13, estão em boa concordância com os resultados analíticos.

Para fortalecer a conclusão de que os dois cones de luz podem ser relacionados a esses dois tipos de excitações, spinons e estados ligados, nós mostramos na Figura 20 o mapa de cores da magnetização na cadeia da direita para diferentes valores de $\Delta_R < 0$.

Para $\Delta_R > \Delta^*$ a velocidade máxima dos estados ligados coincide com a velocidade máxima dos spinons (veja a discussão da seção 1.4), portanto nós vemos somente um cone de luz, como mostrado no painel (a) para $\Delta_R = -0.25$. À medida que nós diminuimos Δ_R , existe um ponto, $\Delta^* = -0.309$, para o qual a velocidade dos estados ligados se torna maior do que a velocidade dos spinons. A partir desse ponto, conseguimos identificar dois cones de luz: um à frente de um grande pulso de magnetização negativa, linha contínua nos painéis (b), (c) e (d), e o outro definido a partir do momento em que a magnetização assume valores não nulos, linha tracejada nesses mesmos painéis.

Como a inclinação do cone de luz é o inverso da velocidade, vemos que, à medida que $\Delta_R \rightarrow -1$, a velocidade do cone de luz associado ao pulso de magnetização diminui, enquanto que a velocidade do outro cone de luz aumenta. Esse resultado é previsto teoricamente para os spinons e os estados ligados, conforme curva teórica mostrada na Figura 13. Além disso, ao calcular essas velocidades usando nossos dados numéricos, observamos que elas estão em ótima concordância com os resultados teóricos. Isso é uma confirmação de que de fato esses cones de luz são definidos a partir dessas excitações.

A visão geral que temos é a seguinte: através do *quench* estudado, conseguimos gerar excitações. Como a cadeia da esquerda está “profundamente” dentro da fase ferromagnética

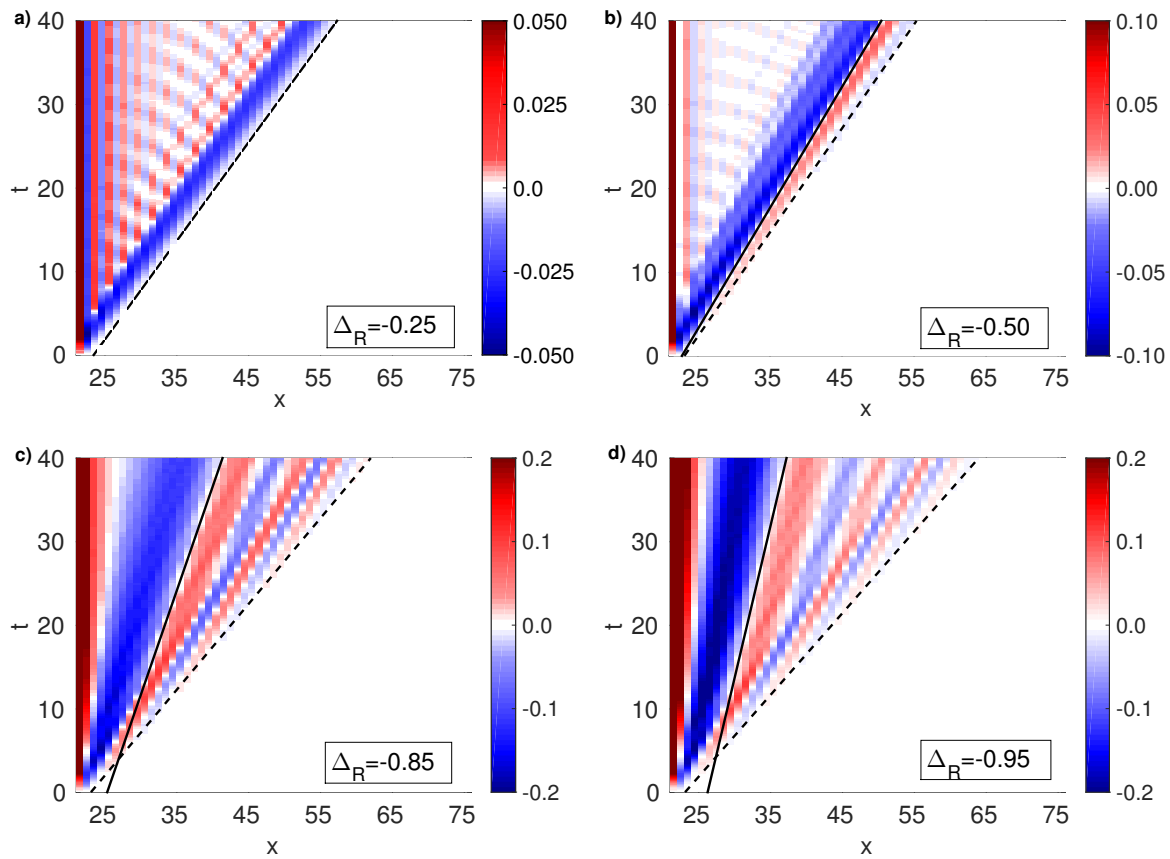


Figura 20 – Mapa de cores da magnetização na cadeia da direita quando $\Delta_R = -0.25$, $\Delta_R = -0.50$, $\Delta_R = -0.85$ e $\Delta_R = -0.95$. As linhas sólidas representam os cones de luz dos spinons e as linhas tracejadas os cones de luz dos estados ligados.

com $\Delta_L = -20$, o *gap* é grande e as excitações não conseguem se propagar nessa cadeia. Já a cadeia da direita não apresenta *gap* e as excitações conseguem facilmente se propagar nela. O efeito da propagação dessas excitações é observado na mudança da magnetização e na variação da entropia, sendo que essas mudanças obedecem um cone de luz. Portanto, para cada tipo de excitação gerada, conseguimos associar um cone de luz tanto para observáveis locais, quanto para a entropia de von Neumann, sendo a borda do cone de luz identificada com as excitações mais rápidas.

Esse protocolo de realizar um *quench* local e a partir do cone de luz gerado identificar o tipo de excitações geradas foi usada na referência [47]. Nesse trabalho os autores consideraram um *quench* local no mesmo modelo que estamos tratando e observaram a assinatura de estados ligados no cone de luz da magnetização. No entanto, como eles estavam trabalhando na fase antiferromagnética, com $\Delta > 1$, os estados ligados em questão, são excitações diferentes das que nós observamos.

2.5 Dependência com δ

Na seção anterior fixamos o valor de δ , parâmetro que define a intensidade da interação entre a componente \hat{z} dos spins da interface (veja a equação 2.1), como sendo igual a Δ_R . Portanto, para cada ponto do gráfico da Figura 13, temos um valor de δ diferente. Não existe nenhum vínculo entre Δ_R e δ , ou seja, para Δ_R fixo, podemos variar livremente o valor de δ . Nesse contexto, uma pergunta que surge é: qual a influência de δ na dinâmica do nosso sistema?

A princípio não há nenhuma restrição de valores que δ possa assumir; portanto, para responder a pergunta acima, fixamos $\Delta_R = 0.5$ e variamos δ no intervalo de $[-20; 20]$. A Figura 21 apresenta uma mapa de cores para a magnetização da cadeia da direita em função do tempo (eixo- x) e da posição (eixo- y) para cada valor de δ que usamos. Observe que há o surgimento do cone de luz e sua velocidade é a mesma para todos os valores de δ . Isso significa que, como poderíamos esperar, a velocidade de propagação da informação depende apenas dos parâmetros do *bulk* da cadeia.

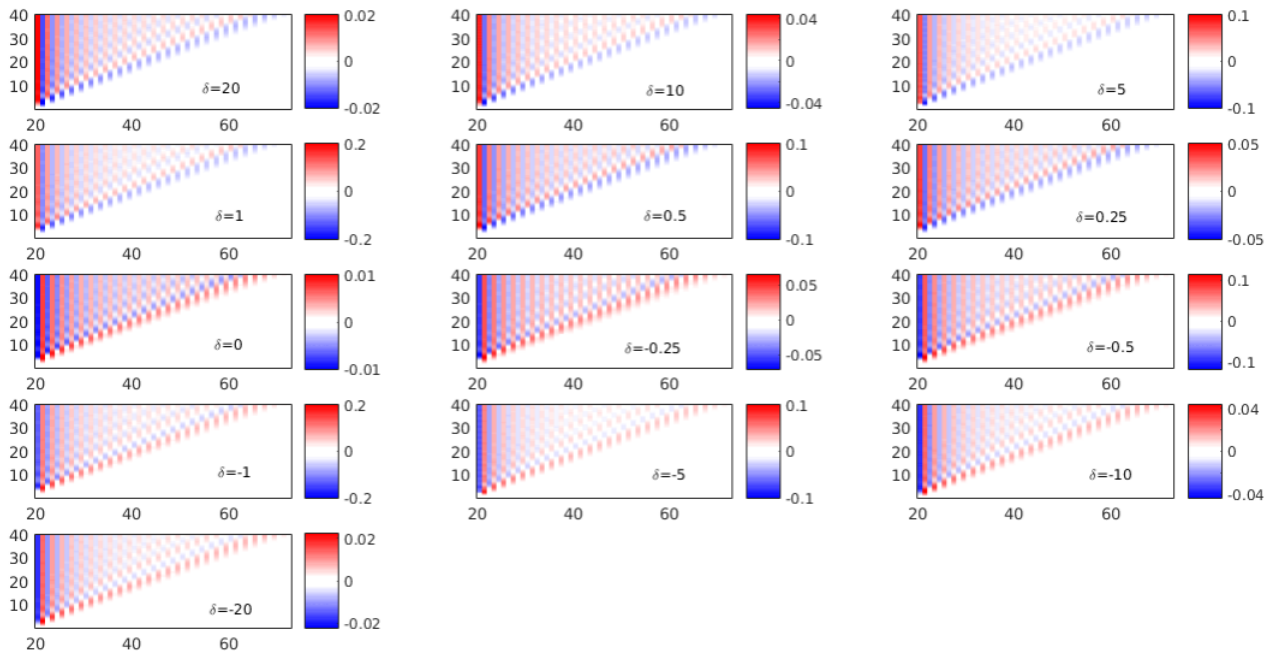


Figura 21 – Mapa de cores da magnetização da cadeia da direita com $\Delta_R = 0.5$ em função do tempo e do sítio. Cada mapa de cor corresponde a um valor de δ diferente no intervalo $[-20; 20]$.

Para valores de $\delta > 0$, o primeiro sítio da cadeia da direita assume magnetização negativa. Esse efeito nós já havíamos discutido: como na cadeia da esquerda os spins têm magnetização positiva, ao conectar as duas cadeias, caso δ seja positivo as orientações entre os spins dos sítios da interface são opostas. Do mesmo modo, se δ for negativo, as orientações entre os sítios da interface deverão ser as mesmas; isso é o que observamos nos gráficos para $\delta < 0$ na Figura 21.

Outro ponto que merece atenção é que há uma certa simetria nos mapas de cores da Figura 21. Note que os valores máximos e mínimos de magnetização assumidos pela cadeia da direita para $\delta = 20$ e $\delta = -20$ são iguais: basta observar que a magnetização vai de -0.02 à 0.02 nesses dois casos. Se compararmos esses dois gráficos, vemos que seus mapas de cores estão invertidos, isto é, onde a magnetização de um é positiva a do outro é negativa e vice-versa, sendo que sua intensidade, ou seja, o módulo da magnetização é o mesmo. Este comportamento também é observado para os outros pares de δ .

Note que não há um comportamento monotônico com relação a $|\delta|$. Poderíamos supor que, para δ muito grande, a interação entre os sítios da interface será muito forte, e conseqüentemente, o primeiro sítio da cadeia da direita ficaria muito magnetizado, e o contrário aconteceria para interação fraca. Mas não é isso que observamos: podemos ver que para $\delta = \pm 20$ os sítios tem magnetização máxima maior do que para $\delta = 0$ e muito menor do que para $\delta = \pm 0.5$. Não temos uma explicação qualitativa para esse comportamento não-trivial.

2.6 Comportamento assintótico

Até o momento analisamos a dinâmica do sistema após a junção das duas cadeias. Algumas perguntas naturais a serem feitas são: qual é o estado assintótico do sistema após a passagem do pulso? Esse estado assintótico é o estado de equilíbrio? Para respondermos a essas questões, precisamos definir primeiro o que chamamos de estado de equilíbrio.

Consideramos estado de equilíbrio o estado fundamental do sistema quando as duas cadeias estão conectadas. Mais especificamente, corresponde ao estado fundamental do hamiltoniano (dado na equação 2.1) tornando $\Theta(t) = \Theta = 1$. Essa é uma forma natural de definir o estado de equilíbrio, uma vez que é este hamiltoniano que governa a dinâmica do sistema. Queremos então saber se o sistema, para tempos longos, vai para o estado de equilíbrio. Para isso, vamos comparar os perfis de magnetização no estado de equilíbrio com o caso obtido pela dinâmica para tempos longos.

O perfil de magnetização do estado de equilíbrio para a cadeia da direita preparada com $J_Z^R = 0.5$ está ilustrado no último gráfico do painel (b) da Figura 14. Observe que aparecem oscilações na magnetização com relação aos sítios, assim como já tínhamos observado durante a dinâmica. A amplitude da magnetização dos sítios decai à medida que nos afastamos da interface, ou seja, sítios mais distantes sentem menos a presença da outra cadeia. Isso era esperado, uma vez que a interação entre os sítios é de curto alcance. Observe que, para o tempo $t = 30$, a magnetização dos sítios mais próximos à interface já se assemelha ao estado de equilíbrio.

Apesar da semelhança aparente entre os perfis de magnetização, podemos fazer uma análise mais quantitativa da proximidade do estado assintótico com o estado de

equilíbrio. Para isso definiremos a distância com relação ao estado de equilíbrio como:

$$DSz(i, t) = \frac{|Sz(i, t) - Sz_{eq}(i)|}{Sz_{eq}(i)}, \quad (2.9)$$

onde $Sz_{eq}(i)$ é a magnetização do i -ésimo sítio no estado de equilíbrio. Essa grandeza nos fornece o quão distante a magnetização de cada sítio da cadeia está do estado de equilíbrio, para cada tempo t .

O painel (a) da Figura 22 apresenta o mapa de cores de $DSz(i, t)$ para a cadeia da direita com $N_R = 100$ sítios, preparada com $\Delta_R = 0.5$. Observe que há o aparecimento de um cone luz semelhante ao que observamos na seção 2.3. Era de se esperar o aparecimento de um cone de luz, pois o estado de equilíbrio é fixo e a dinâmica de $DS(i, t)$ vem da evolução temporal da magnetização, portanto esse cone de luz, cuja borda é definida pela linha contínua, é o mesmo observado no painel (a) da Figura 14. As linhas tracejadas indicam cortes para sítios fixos, sendo que a evolução temporal de cada um desses sítios é apresentada no painel (b). A partir desses gráficos, podemos analisar o efeito de não-equilíbrio gerado pelo *quench*. Vimos que a dinâmica gerada pelo *quench* gera um cone de luz e são justamente os sítios que estão próximos à borda desse cone de luz os que estão mais distantes do estado de equilíbrio. Por outro lado, uma vez que a perturbação se propaga pela cadeia, vemos que os sítios i que estão profundamente dentro do cone de luz, ou seja, $N_L + i \ll N_L + vt \ll N_L + N_R$, onde v é a velocidade do cone de luz, estão mais próximos do estado de equilíbrio.

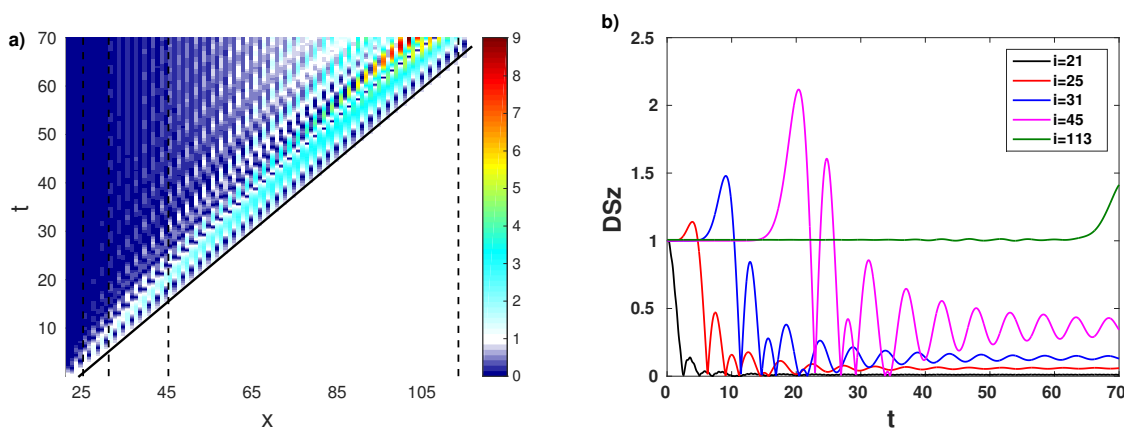


Figura 22 – (a) Mapa de cores de DSz para $\Delta_R = 0.5$. As linhas pontilhadas indicam os cortes mostrados no painel (b); a linha sólida corresponde ao cone de luz dos spinons, definido na Figura 14. (b) Distância para o estado de equilíbrio para os sítios $i = 21$, $i = 25$, $i = 31$, $i = 45$ e $i = 113$ na cadeia da direita. Resultados obtidos com $N_R = 100$ sítios na cadeia da direita.

O painel (b) da Figura 22 apresenta a função distância $DSz(i, t)$ em função do tempo para diferentes sítios. Há oscilações para a região dentro do cone de luz e o decaimento da amplitude dessas oscilações no tempo é não homogêneo. De fato, as

oscilações decaem mais rapidamente no tempo para os sítios mais próximos da interface em comparação com os sítios do *bulk* da cadeia. Um efeito de borda semelhante foi observado em funções correlações dependentes do tempo para cadeias de spin com condições de contorno abertas [85]. Além disso, se tirarmos a média temporal sobre essas oscilações que aparecem em DSz a fim de obtermos seu comportamento assintótico, observamos que os valores obtidos são não nulos e aumentam para sítios mais distantes em relação à interface. Nós interpretamos esse resultado como um efeito de tamanho finito. Para confirmar essa hipótese, nós analisamos DSz para alguns sítios em função do tamanho da cadeia da direita.

A Figura 23 apresenta o comportamento assintótico da grandeza que mede a distância em relação ao estado de equilíbrio para três sítios fixos, $i = 21$, $i = 25$ e $i = 31$, para cadeias de tamanho diferentes. Os pontos foram obtidos por médias temporais a partir do instante de tempo em que não há mais tendência na diminuição da distância; a média foi feita nas últimas 20 unidades de tempo. Tomando como exemplo o painel (b) da Figura 22, essa média temporal sobre as oscilações é feita a partir de $t=50$.

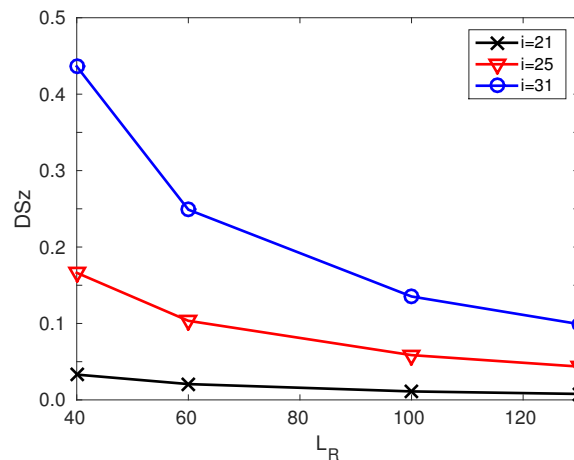


Figura 23 – Comportamento assintótico da distância para o estado de equilíbrio para os sítios $i = 21$, $i = 25$ e $i = 31$ como função do tamanho da cadeia da direita para $\Delta_R = 0.5$.

Observe que, para o mesmo sítio, à medida que aumentamos o tamanho da cadeia a distância DSz diminui, sendo que a taxa de decaimento é maior para sítios mais distantes da interface. Esse decaimento com o tamanho da cadeia sugere que, somente no limite em que a cadeia se torna semi-infinita, o sistema como um todo atinge o estado de equilíbrio para tempos longos, como esperado para um *quench* local [86].

2.7 Conclusão

Neste trabalho, estudamos a dinâmica da magnetização e da entropia de emaranhamento após um *quench* local que conecta duas cadeias finitas de spin $-\frac{1}{2}$ descritas pelo modelo anisotrópico de Heisenberg XXZ e observamos que a dinâmica de não equilíbrio é governada por excitações definidas no equilíbrio. De forma mais específica, nós conectamos uma cadeia na fase ferromagnética com outra na fase *LL* e vimos que o *quench* cria excitações que se propagam a partir da interface entre as cadeias. Quando a cadeia da esquerda está perto do ponto ferromagnético isotrópico, nós observamos pequenas variações na magnetização por sítio, que se propagam com a velocidade máxima dos mágnons. No entanto, essas excitações desaparecem quando a cadeia está “profundamente” na fase ferromagnética, devido ao *gap* dos mágnons.

Já a cadeia da direita apresenta uma dinâmica mais rica. Quando ela está na fase *LL* com o parâmetro anisotrópico positivo, a informação se propaga com a velocidade máxima dos spinons, definindo um cone de luz dos spinons, tanto para magnetização quanto para a variação de entropia. Entretanto, quando o parâmetro de anisotropia $\Delta < \Delta^* = -0.309$, nós observamos um segundo cone de luz, relacionado com outro tipo de excitação, os estados ligados, que surgem em um subespaço de magnetização nula.

Vimos que a intensidade do acoplamento entre as cadeias não interfere na velocidade com que a informação se propaga. Isso depende somente dos parâmetros do *bulk* da cadeia em que o pulso está se propagando. No entanto, δ interfere e de modo não-trivial no valor máximo (ou mínimo) de magnetização que o primeiro sítio da cadeia da direita pode assumir.

Após a passagem do pulso o sistema relaxa; porém, para cadeias finitas, o sistema como um todo não vai para o estado de equilíbrio. O sistema se aproxima do estado de equilíbrio de uma forma não homogênea: da interface para a borda. A distância do equilíbrio diminui à medida que aumentamos o tamanho da cadeia; acreditamos assim que, para cadeias semi-infinitas, o sistema irá atingir o estado de equilíbrio para tempos longos.

3 Propriedade de Blindagem no modelo de Ising com campo transversal

Neste capítulo vamos resumir o trabalho realizado em colaboração com Natália Móller, aluna de doutorado do professor Raphael Campos Drumond, publicado na revista *Physical Review E* no ano de 2018 [62]. Neste trabalho investigamos uma propriedade que surge para cadeias descritas pelo modelo de Ising com campo transversal. Mais especificamente, mostramos que, se a cadeia estiver no estado de Gibbs (estado global) e um certo sítio L da cadeia tiver campo nulo, o estado reduzido da parte da cadeia à esquerda (direita) do sítio L independe dos parâmetros da cadeia à direita (esquerda) de L . A esse efeito demos o nome de propriedade de blindagem. Daremos mais detalhes sobre ele a seguir, com maior destaque à minha contribuição para o trabalho, que foram as simulações numéricas usando diagonalização exata e a técnica t-DMRG; a parte do teorema e sua demonstração foi realizada pela Natália Móller.

3.1 Modelo de Ising com campo transversal

O modelo de Ising é o modelo mais simples para se estudar magnetismo. Nele, a interação entre os spins é somente em uma componente. Apesar de sua simplicidade, continua sendo um modelo amplamente estudado na literatura [18, 27, 66, 67]. Ele pode ser simulado em redes óticas, como foi mostrado na seção 1.1 e além disso pode ser usado para descrever alguns compostos [87].

O hamiltoniano do modelo de Ising com campo transversal é dado por

$$H = - \sum_i J_i \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z - \sum_i h_i \sigma_i^X, \quad (3.1)$$

sendo σ_i^Z e σ_i^X os operadores de Pauli. Os coeficientes J_i e h_i correspondem à intensidade de interação entre os sítios vizinhos e do campo externo aplicados no sítio i , respectivamente. Note que o campo é perpendicular à componente z do spin, por isso o termo “campo transversal” no nome do modelo. Para $h = 0$, se $J_i > 0$, temos ordenamento ferromagnético e, se $J_i < 0$, temos ordenamento antiferromagnético. Observe que esse hamiltoniano pode ser obtido do modelo XXZ, dado na equação 1.6, tomando o limite $\Delta \rightarrow \infty$. O modelo de Ising apresenta solução exata via transformadas de Jordan-Wigner (veja apêndice A) e apresenta transição da fase (anti)ferromagnética para a fase paramagnética para $h = 1$ a temperatura nula, onde não há ordenamento magnético.

3.2 Propriedade de blindagem

Vamos considerar uma cadeia de spins descrita pelo modelo de Ising com campo transversal preparada no estado de Gibbs a uma dada temperatura T . O estado global do sistema é da forma

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{tr}\{e^{-\beta H}\}}, \quad (3.2)$$

sendo $\beta = 1/\kappa_B T$, onde κ_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura e H é o hamiltoniano do sistema.

Vamos agora assumir que os valores J_i e h_i ao longo da cadeia são arbitrários, exceto para um único sítio L em que o campo externo deve ser nulo. Usando essas duas hipóteses: cadeia preparada no estado de Gibbs e o campo em um sítio ser nulo podemos enunciar o seguinte teorema:

Teorema 1. *Seja uma cadeia com N sítios descrita pelo modelo de Ising transversal e suponha que para um sítio fixo L nós temos $h_L = 0$. Se o estado ρ da cadeia é o estado de Gibbs, então o estado reduzido dos sítios $L \dots N$ não tem dependência com $h_1 \dots h_{L-1}$ e $J_1 \dots J_{L-1}$, e é dado por*

$$\rho_{L\dots N} = \frac{e^{-\beta H''}}{\text{tr}\{e^{-\beta H''}\}}, \quad (3.3)$$

onde

$$H'' = - \sum_{i=L}^{N-1} J_i \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z - \sum_{i=L+1}^N h_i \sigma_i^X. \quad (3.4)$$

O que esse teorema diz é que, se uma cadeia descrita pelo modelo de Ising transversal tem um sítio L com campo nulo, como mostra a Figura 24, o estado reduzido de uma parte da cadeia, digamos o lado direito de L , independe dos parâmetros da parte da cadeia correspondente ao lado esquerdo e vice-versa. Isso significa que poderíamos alterar os parâmetros de um lado da cadeia e o outro lado não “sentiria” o efeito dessa mudança. De certa forma esse sítio L com campo nulo blindar um lado da cadeia do outro. Para esse efeito damos o nome de propriedade de blindagem do modelo de Ising com campo transversal. Mais do que essa independência entre os estados de cada uma das partes, mostramos que o estado reduzido é o estado de Gibbs da respectiva parte da cadeia. A demonstração desse teorema não será feita aqui, os detalhes podem ser encontrados nas referências [62, 88].

Observe que o estado global ρ depende dos parâmetros dos dois lados da cadeia, portanto, se mudamos os parâmetros de um dos lados, isso implica na mudança do estado global. O mais surpreendente nessa propriedade é que, intuitivamente, era de se esperar que, somente se a interação J_L que faz a comunicação entre as duas partes da cadeia fosse nula, é que os parâmetros de uma parte não interfeririam na outra. Porém, não é

isso que é observado. Inclusive a interação pode assumir valores elevados e ainda assim a propriedade de blindagem continua valendo.

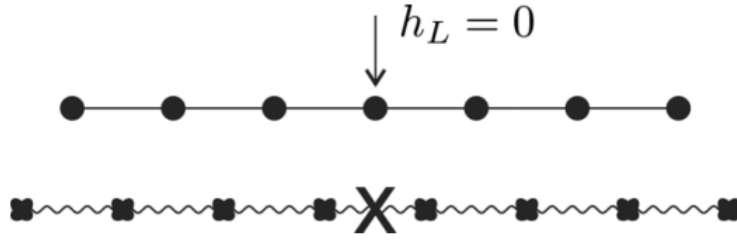


Figura 24 – Primeira cadeia: cadeia de Ising original onde foi feito $h_L = 0$. Segunda cadeia: cadeia de Ising dual, mostrando que anular o campo no sistema original implica em desligar a interação no sistema dual.

Uma interpretação física para esse resultado é possível usando a dualidade do modelo de Ising transversal [89]. Esta dualidade nos permite mapear a cadeia original de Ising em uma outra cadeia de Ising, chamada de cadeia dual, onde a interação do sistema original tem o papel de campo no sistema dual e o campo da cadeia original passa a ser a interação na cadeia dual. Para entender essas trocas, vamos definir os seguintes operadores

$$\mu_{i+1/2}^z = \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z, \quad \mu_{j+1/2}^x = \prod_{k=j+1}^N \sigma_k^x \quad (3.5)$$

para $i = 1, \dots, N - 1$ e $j = 1, \dots, N$.

Definindo $\mu_{N+1/2}^z = \sigma_N^z$, $\mu_{1/2}^z = \sigma_1^z$ e $\mu_{1/2}^x = \mathbb{1}$, temos que o hamiltoniano original, veja a equação 3.1, pode ser escrito como

$$H = - \sum_{j=1}^{N-1} J_j \mu_{j+1/2}^z - \sum_{j=1}^N h_j \mu_{j-1/2}^x \mu_{j+1/2}^x. \quad (3.6)$$

Observe que agora J_j passa a ter o papel de campo e h_j passa a se comportar como interação. A representação desse mapeamento está ilustrada na Figura 24, a primeira cadeia é a original e a segunda é a cadeia dual. Como fizemos $h_L = 0$, temos duas cadeias separadas no sistema dual, portanto a comunicação entre elas não existe. Logo, o estado de uma das cadeias, por exemplo a da esquerda, não depende dos parâmetros da outra cadeia.

Um outro ponto que investigamos é se a propriedade de blindagem vale para sistemas de mais de uma dimensão. O painel (a) da Figura 25 mostra um sistema que é separado em três regiões: A , B e S . A região S é a interface que separa as regiões A e B de modo que não há interação entre os sítios dessas duas regiões. Os sítios da região A só interagem entre si, o mesmo é válido para região B . Foi mostrado que, se a interface tem apenas um sítio e o campo nela é nulo, a propriedade de blindagem continua valendo, independente de como os sítios da região A e B interagem entre si. No entanto, se a

interface tem mais do que um sítio, a propriedade de blindagem não vale para o estado de Gibbs.

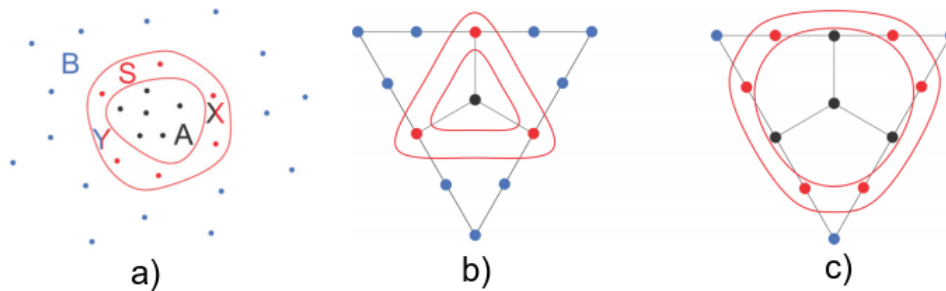


Figura 25 – Painel (a): uma rede dividida em três regiões A , B e S , os sítios da região A são separados por uma interface S de modo a não ter interação com os sítios da região B . Painéis (b) e (c) dois exemplos de redes separadas nas regiões A , B e S que usamos para obter a magnetização do estado fundamental.

Como a propriedade de blindagem também vale para o estado fundamental, uma vez que o estado de Gibbs vai para o estado fundamental no limite em que $\beta \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$). Investigamos se ela continua valendo para mais um sítio na interface para o estado fundamental. Calculamos então o valor esperado da magnetização por sítio do estado fundamental para um sistema de $N = 13$ sítios via diagonalização exata. O sistema está apresentado nos painéis (b) e (c) da Figura 25. Nesses painéis os sítios em azul fazem parte da região B , em vermelho temos a interface S e os sítios de preto compõe a região A . Observe que o sistema é o mesmo, o que muda do painel (b) para o (c) é a posição da interface.

Os painéis (a) e (b) Figura 26 apresentam a magnetização por sítio do estado fundamental para o sistema ilustrado nos painéis (b) e (c) da Figura 25, respectivamente.

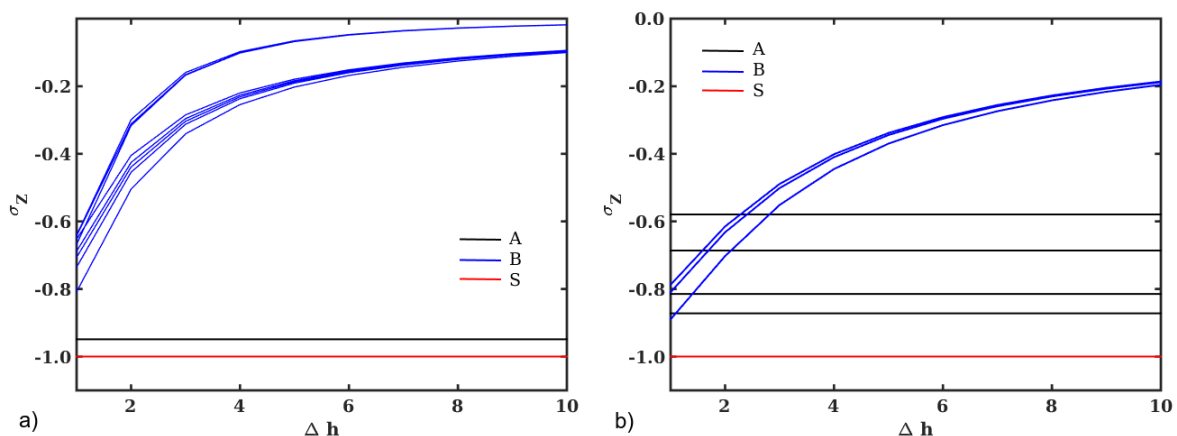


Figura 26 – Painéis (a) e (b): magnetização por sítio do estado fundamental para as redes apresentadas nos painéis (b) e (c) da Figura 25, respectivamente. Variou-se o campo na região B por uma quantidade Δh .

Nesse cálculo fizemos o seguinte procedimento: na interface, região S , fizemos o campo nulo; na região B sorteamos o campo de cada sítio aleatoriamente entre 0 e 1; na região A fixamos o campo em $h=1$ para o sistema referente ao painel (b) da Figura 25, já para o sistema do painel (c) da Figura 25 distribuimos o campo de cada sítio como sendo $h = 1, h = 2, h = 3$ e $h = 4$; definimos $J = 1$ para a interação entre todos os sítios. Para essa configuração calculamos o estado fundamental do sistema e então obtivemos a magnetização por sítio. Feito isso, adicionamos uma unidade no campo de todos os sítios pertencentes à região B , calculamos o novo estado fundamental e nova magnetização de cada sítio. Realizamos esse procedimento de acrescentar uma unidade no campo dos sítios da região B 10 vezes. Os valores da magnetização por sítio em função da variação do campo na região B (Δh) estão apresentados na Figura 26. As curvas azuis correspondem a magnetização dos sítios da região B , as vermelhas da região S e as pretas da região A . Observe que o campo varia somente para os sítios pertencentes a região B .

Nos painéis (a) e (b) da Figura 26 vemos que, à medida que o campo dos sítios da região B aumenta, o valor da magnetização destes se aproxima de zero. Observe que a magnetização dos sítios da região A e S não se alteram com a mudança dos parâmetros na região B . Portanto, a região S está blindando a região A das mudanças que acontecem em B .

3.3 Dinâmica

Podemos ser levados a pensar que a propriedade de blindagem é consequência dos hamiltonianos de cada um dos lados da cadeia comutarem. Essa relação de comutação é importante, no entanto não é condição suficiente para validar o teorema. A estrutura do hamiltoniano em si importa, caso contrário poderíamos ter generalizado esse efeito para outros modelos.

Apesar da relação de comutação dos hamiltonianos não ser a única condição para demonstrar o teorema, ela desempenha um papel importantíssimo para a dinâmica do sistema. Considere que uma rede possa ser dividida em duas regiões X e Y , e seja $H = H_X + H_Y$ o hamiltoniano de qualquer sistema de muitos corpos, onde H_X (H_Y) é hamiltoniano correspondente à região X (Y). Considere um observável \mathcal{O} que atua somente em uma região, vamos considerar a Y , por exemplo. Se o hamiltoniano das duas regiões comutam, isto é, $[H_X, H_Y] = 0$, temos que o valor esperado do observável para um tempo t é dado por

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{O}(t) \rangle &= \text{tr}\{\rho(t)\mathcal{O}\} \\
&= \text{tr}\{e^{-itH}\rho e^{itH}\mathcal{O}\} \\
&= \text{tr}\{e^{-itH_X} e^{-itH_Y} \rho e^{itH_Y} e^{itH_X} \mathcal{O}\} \\
&= \text{tr}\{e^{-itH_Y} \rho e^{itH_Y} \mathcal{O}\},
\end{aligned} \tag{3.7}$$

onde usamos a propriedade cíclica do traço. Essa equação nos diz que a evolução temporal do valor esperado do observável \mathcal{O} é governada por H_Y ; isto significa que a região X da rede não tem influência alguma na dinâmica dos observáveis da região Y .

Aproveitamos a ideia da propriedade de blindagem do modelo de Ising transverso para o estado de equilíbrio, discutido na seção 3.2, como motivação para estudar o efeito de um *quench* local em uma cadeia composta por duas partes em que seus respectivos hamiltonianos comutam.

Fizemos então o seguinte protocolo de *quench*: preparamos uma cadeia com $N = 60$ sítios no estado fundamental do modelo de Ising transverso considerando $J = 1$ e o campo $h = 0.5$ em todos os sítios, exceto em um onde o campo é nulo; em seguida aplicamos um campo, também ao longo de x mas com sinal invertido, de valor $h = -10$, no primeiro sítio da cadeia e deixamos o sistema evoluir. Escolhemos o campo ser nulo no sítio $i = 15$. A Figura 4.1 apresenta um mapa de cores da magnetização ao longo de z por sítio em função do tempo e da posição. Utilizamos t-DMRG para simular a dinâmica desse sistema.

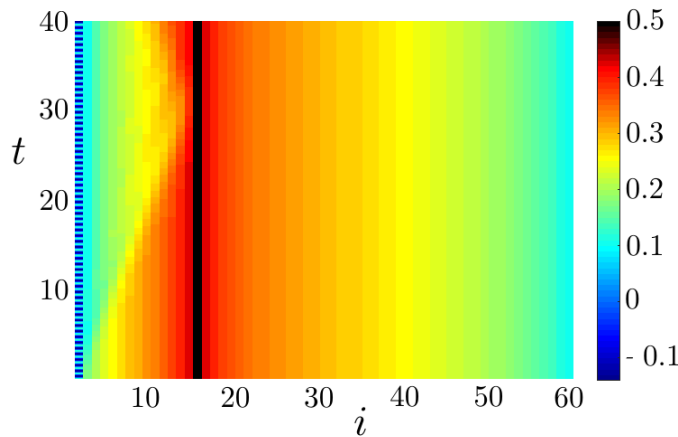


Figura 27 – Mapa de cores da magnetização em função do sítio e do tempo para uma cadeia de Ising transverso com $N = 60$ sítios. Foi realizado um *quench* que altera o campo no sítio $i = 1$; o sítio $i = 15$ tem campo nulo antes e após o *quench*.

Ao fazer o campo nulo em um sítio, criamos duas regiões na cadeia sendo que seus respectivos hamiltonianos comutam, portanto a dinâmica de um lado não interfere no outro lado, como mostra a equação 3.7. É justamente isso que observamos na Figura

4.1. Note que há a formação de um cone de luz na região onde foi feito o *quench* e ele é refletido no sítio em que o campo é nulo. Portanto, este sítio blinda o lado direito de qualquer perturbação feita no lado esquerdo, a informação não consegue passar por ele. Isso é um efeito de blindagem na dinâmica do sistema, que é consequência de dividir o sistema em regiões em que os respectivos hamiltonianos comutam.

3.4 Conclusão

Neste trabalho analisamos uma cadeia de Ising com campo transversal onde fixamos o campo externo em um sítio $i = L$ como sendo nulo. Mostramos que se a cadeia estiver no estado de equilíbrio, o estado reduzido da cadeia à direita do sítio $i = L$ é um estado de Gibbs e independe dos parâmetros da cadeia à esquerda deste sítio. Para esse efeito, demos o nome de propriedade de blindagem do modelo de Ising. Observamos numericamente que esse resultado se estende para o estado fundamental para sistemas com mais de uma dimensão.

Vimos também que se separarmos uma cadeia em duas regiões I e II , de tal forma que o hamiltoniano dessas regiões comute, ao realizar uma perturbação na região I , ela não se propaga para a região II . Observamos essa propriedade de blindagem dinâmica numericamente em uma cadeia de Ising com campo transversal com um sítio (do interior da cadeia) com campo nulo. Fizemos um *quench* local no primeiro sítio e vimos que o cone de luz que aparece na magnetização por sítio é refletido no sítio de campo nulo.

Parte II: Cadeia de spin como sistema quântico aberto

4 Dinâmica de sistemas quânticos abertos

Nesta segunda parte da tese, apresentaremos nosso segundo trabalho de Doutorado. Este trabalho foi feito em colaboração com o professor Emmanuel Pereira do Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais. O nosso trabalho consiste em estudar retificação na corrente de energia e de spin em uma cadeia XXZ acoplada a reservatórios magnéticos em suas extremidades. Antes de entrarmos em detalhes com respeito aos nossos resultados, vamos apresentar de forma geral os aspectos que envolvem a dinâmica e alguns resultados encontrados na literatura a respeito desse tipo de sistema.

O sistema global, cadeia mais reservatórios, apresenta uma dinâmica unitária. No entanto, nós não estamos interessados nos reservatórios, pois tipicamente não temos acesso aos seus graus de liberdade; o procedimento padrão é então tomar o traço sobre o estado dos reservatórios, restando dessa forma apenas o estado do sistema de interesse. Portanto, a dinâmica da cadeia, que é afetada pela presença dos reservatórios, não será mais unitária. Estamos tratando agora de um sistema quântico aberto, cuja evolução temporal pode ser descrita via equação mestra.

4.1 Introdução

Em sistemas quânticos abertos, o sistema S que estamos interessados em estudar interage com outro sistema muito “maior”, denominado reservatório R , como ilustrado na Figura 28. Na prática, nenhum sistema quântico está perfeitamente isolado. Em algumas situações, essa interação com o ambiente¹ se torna relevante e pode, por exemplo, explicar a emissão espontânea de um átomo [90]. Um dos interesses no estudo de sistemas quânticos abertos é saber como a dinâmica de S é afetada pela presença do reservatório.

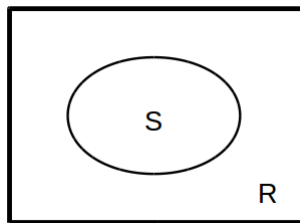


Figura 28 – Representação pictórica de um sistema quântico S interagindo com um reservatório R .

O sistema S pode apresentar uma dinâmica interna por si só. No entanto, devido ao seu acoplamento com o reservatório, a evolução temporal dos estados pertencentes

¹ Ambiente é o termo mais geral usado em sistemas quânticos abertos. Reservatório se refere a um ambiente com infinitos graus de liberdade [51].

ao sistema de interesse sofrerá influência do ambiente. Portanto, a dinâmica não será mais unitária, como é observado em sistemas fechados. A evolução temporal é dada via formalismo da equação mestra.

O hamiltoniano total envolvendo o sistema mais o reservatório é dado por

$$H = H_S + H_R + H_{SR}, \quad (4.1)$$

sendo que o primeiro e segundo termos são os hamiltonianos do sistema e do reservatório, respectivamente, e H_{SR} representa a interação entre S e R . O estado total envolvendo as duas partes é descrito pelo operador densidade $\rho(t)$; como o reservatório tem infinitos graus de liberdade, encontrar uma solução para sua evolução temporal se torna uma tarefa muito complexa, além disso nem sempre temos acesso a sua estrutura interna. Portanto, para analisar somente o sistema S , devemos tomar o traço sobre os graus de liberdade de R , isto é, $\rho_S(t) = \text{tr}_R\{\rho(t)\}$.

A equação do movimento, na representação de interação,² para o sistema global, $\tilde{\rho}$, é dada por

$$\frac{d\tilde{\rho}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H_{SR}(t), \tilde{\rho}(t)]. \quad (4.2)$$

Integrando dos dois lados da igualdade, temos

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t ds [H_{SR}(s), \tilde{\rho}(s)]; \quad (4.3)$$

inserindo essa forma integral na equação 4.2 e tomando o traço parcial sobre o reservatório, temos:

$$\frac{d\tilde{\rho}_S(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds \text{tr}_R[H_{SR}(t), [H_{SR}(s), \tilde{\rho}(s)]], \quad (4.4)$$

onde fizemos

$$\text{tr}_R[H_{SR}(t), \tilde{\rho}(0)] = 0, \quad (4.5)$$

sendo esse resultado válido desde que o valor esperado dos termos de interação de S com R seja zero para o estado inicial do reservatório.

A equação 4.4 descreve a dinâmica para o sistema de interesse. Note que $\tilde{\rho}_S(t)$ depende do estado global e de toda a história passada através da integração sobre $\tilde{\rho}(s)$. Para chegar na equação mestra, duas aproximações são feitas: a aproximação de Born e a aproximação de Markov [51, 91].

Na aproximação de Born, consideramos que o acoplamento do sistema com o ambiente é fraco, de tal modo que a influência do sistema sobre o reservatório é pequena.

² Na representação de interação, temos que $\tilde{\rho}(t) = e^{i/\hbar(H_S+H_R)t}\rho(t)e^{-i/\hbar(H_S+H_R)t}$.

Portanto, o estado global para qualquer tempo t pode ser aproximado por um estado produto entre o sistema e o reservatório

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}_S(t) \otimes \rho_R(0). \quad (4.6)$$

Como o reservatório é muito maior que o sistema de interesse e o acoplamento entre os dois subsistemas é muito fraco, temos que o estado do reservatório praticamente não se altera. Através dessa aproximação, a equação 4.4 fica

$$\frac{d\tilde{\rho}_S(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds \operatorname{tr}_R[H_{SR}(t), [H_{SR}(s), \tilde{\rho}_S(s) \otimes \rho_R(0)]], \quad (4.7)$$

note que o estado do sistema S ainda carrega dependência da toda sua história.

A próxima aproximação é a aproximação de Markov. Nela substituímos $\tilde{\rho}_S(s)$ por $\tilde{\rho}_S(t)$ e chegamos na seguinte equação

$$\frac{d\tilde{\rho}_S(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds \operatorname{tr}_R[H_{SR}(t), [H_{SR}(s), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \rho_R(0)]]. \quad (4.8)$$

A aproximação de Markov considera que as correlações criadas no ambiente devido à sua interação com o sistema decaem muito mais rápido do que o tempo de relaxação do sistema S . Portanto, a escala de tempo no reservatório é muito menor comparada à escala de tempo em que o sistema de interesse muda consideravelmente.

Por princípios físicos, a aproximação de Markov parece ser razoável. O estado de S pode depender de sua história, pois seus estados anteriores podem realizar mudanças no reservatório, e essas mudanças podem refletir de volta no estado do sistema S , devido à interação H_{SR} . No entanto, se o reservatório for muito grande, não é de se esperar que ele preserve essas mudanças produzidas pela interação com o sistema de interesse, não o suficiente para afetar a dinâmica futura de S . Torna-se então uma questão de escala de tempo das correlações de R versus a escala de tempo para mudanças significativas em S . Logo, podemos desprezar o efeito do passado do sistema S no seu tempo futuro.

O rápido decaimento das correlações é válido para o caso em que o reservatório é infinitamente grande e envolve um contínuo de frequências. Fazendo essas considerações sobre o ambiente, usando as aproximações de Born-Markov e voltando para a representação de Schrödinger, obtemos a equação mestra na forma de Lindblad ³

$$\frac{d\rho_S}{dt} = \mathcal{L}[\rho_S], \quad (4.9)$$

onde

$$\mathcal{L}[\rho_S] = -\frac{i}{\hbar}[H_S, \rho_S] + \mathcal{D}[\rho_S]. \quad (4.10)$$

³ A dedução completa e mais detalhada da equação mestra na forma de Lindblad pode ser encontrada nas referências [51, 91].

O primeiro termo reproduz a equação de von Neumann [92], que gera uma evolução temporal unitária. Já a interação com o banho está representada pelo segundo termo. O dissipador $\mathcal{D}[\rho_S]$ é da forma

$$\mathcal{D}[\rho_S] = \sum_k \left(L_k \rho_S L_k^\dagger - \frac{1}{2} \{L_k^\dagger L_k, \rho_S\} \right), \quad (4.11)$$

onde o índice k fornece o número de operadores de Lindblad L_k atuando no sistema S . As equações 4.10 e 4.11 são expressões gerais obtidas para sistemas que interagem com qualquer reservatório que gere uma dinâmica Markoviana. Nesse tipo de dinâmica o estado do sistema em um tempo futuro ρ_S depende somente do estado no tempo presente, não dependendo da história de $\rho_S(t_0)$.

As considerações feitas até o momento sobre o reservatório foram as de que ele é muito grande em relação ao sistema de interesse e apresenta um contínuo de modos. As características, isto é, o tipo de reservatório, se é térmico, magnético ou de partículas, e como eles atuam no sistema são definidas pelos operadores de Lindblad.

No contexto de sistemas de muitos corpos em baixas dimensões, com o foco voltado para uma dimensão, esses reservatórios podem atuar ao longo de toda a cadeia, como se o sistema estivesse sido totalmente “mergulhado” no reservatório, ou atuar somente nas extremidades. Este último caso é um bom modelo para se estudar propriedades de transportes. Encontramos na literatura exemplos de reservatórios que trocam partículas, injetando e retirando partículas das cadeias [48], e até mesmo reservatórios magnéticos, que forcem os spins a terem uma certa polarização [54, 93].

4.2 Cadeia com reservatórios magnéticos nas extremidades

Como discutimos no início do capítulo, o sistema que investigaremos é uma cadeia de spins conectada a reservatórios magnéticos em suas extremidades. A Figura 29 ilustra essa configuração, os reservatórios atuam somente no primeiro e último spin da cadeia.

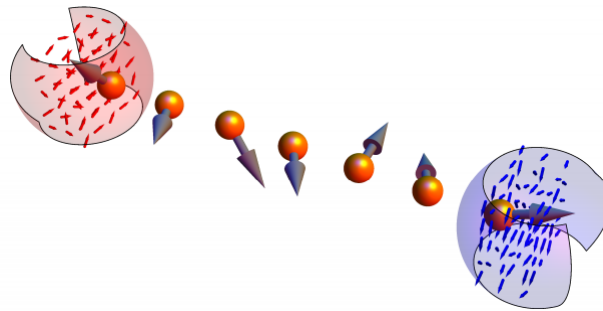


Figura 29 – Representação de uma cadeia de spins com reservatórios atuando nas extremidades. Figura retirada da Ref. [94].

A cadeia de spin-1/2 é descrita pelo modelo XXZ, que é o mesmo do trabalho anterior e cujas propriedades estão discutidas na seção 1.4; hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} \left[\alpha \left(\sigma_i^X \sigma_{i+1}^X + \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Y \right) + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right] + \sum_{i=1}^N B_i \sigma_i^Z, \quad (4.12)$$

sendo que aqui escrevemos em termos das matrizes de Pauli σ^β ($\beta = X, Y, Z$). Note que aplicaremos um campo externo B_i paralelo à componente z do spin. A constante α está associada com a interação de troca e vamos tomá-la como $\alpha = 1$.

Como a cadeia de spins está conectada a reservatórios, sua dinâmica não é mais gerada por uma evolução unitária. Vamos assumir que os reservatórios são markovianos, portanto a dinâmica pode ser obtida pela equação mestra na forma de Lindblad, equação 4.10. Estendendo para esse caso de dois reservatórios, podemos escrever

$$\mathcal{L}[\rho] = -i[H, \rho] + \mathcal{D}_L[\rho] + \mathcal{D}_R[\rho]. \quad (4.13)$$

Aqui fizemos $\hbar = 1$ e retiramos o subíndice S de ρ , uma vez que a partir de agora fica subentendido que ρ é a matriz densidade da cadeia. Os dissipadores apresentam a mesma forma dada pela equação 4.11, sendo $\mathcal{D}_L(\mathcal{D}_R)$ o dissipador atuando na extremidade esquerda (direita) da cadeia

$$\mathcal{D}_{L,R}[\rho] = \sum_{k=\pm} \left(L_k \rho L_k^\dagger - \frac{1}{2} \{L_k^\dagger L_k, \rho\} \right). \quad (4.14)$$

Dissipadores semelhantes aos que estamos considerando podem ser experimentalmente realizados e controlados em sistemas de átomos frios [95, 96]. Além disso, reservatórios térmicos e de spin podem ser implementados e suas respectivas correntes podem ser medidas [97, 98].

Esse tipo de configuração é amplamente estudada na literatura [54, 56, 57, 93, 99, 100], portanto vamos usar as mesmas definições de reservatórios lá apresentadas. Os reservatórios magnéticos são responsáveis por induzir uma certa magnetização nas extremidades da cadeia. Para isso os operadores de Lindblad são da forma

$$L_{L,\pm} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{2}} (1 \pm f_L) \sigma_1^\pm \quad \text{e} \quad L_{R,\pm} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{2}} (1 \pm f_R) \sigma_N^\pm, \quad (4.15)$$

portanto o dissipador total tem a forma

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_L[\rho] + \mathcal{D}_R[\rho] &= \frac{\varepsilon}{4} \{ (1 + f_L) [2\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - (\sigma_1^- \sigma_1^+ \rho + \rho \sigma_1^- \sigma_1^+)] \\ &+ (1 - f_L) [2\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - (\sigma_1^+ \sigma_1^- \rho + \rho \sigma_1^+ \sigma_1^-)] \\ &+ (1 + f_R) [2\sigma_N^+ \rho \sigma_N^- - (\sigma_N^- \sigma_N^+ \rho + \rho \sigma_N^- \sigma_N^+)] \\ &+ (1 - f_R) [2\sigma_N^- \rho \sigma_N^+ - (\sigma_N^+ \sigma_N^- \rho + \rho \sigma_N^+ \sigma_N^-)] \}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

onde ε é a intensidade do acoplamento do reservatório com a cadeia, $\sigma_j^\pm = (\sigma_j^X \pm i\sigma_j^Y)/2$ são os operadores levantamento e abaixamento, de spin e são responsáveis por fixar a magnetização nos sítios $j = 1$ e $j = N$; $f_{L,R}$ é um parâmetro que nos informa qual é a “força” com que cada operador atua nos sítios das extremidades da cadeia.

Note que os operadores são aplicados no primeiro e no último sítio. Temos então quatro operadores de Lindblad, dois para cada extremidade. Portanto, em cada extremidade, existe um operador (σ^+) que força uma polarização *up* nos spins com “peso” $\sqrt{\varepsilon/2(1+f_L)}$ e $\sqrt{\varepsilon/2(1+f_R)}$ para o primeiro e último sítios, respectivamente, e existe um operador (σ^-) forçando uma polarização *down* com peso $\sqrt{\varepsilon/2(1-f_L)}$ e $\sqrt{\varepsilon/2(1-f_R)}$ no primeiro e último sítios. Do ponto de vista de férmions sem spins, esses operadores correspondem a fornecer ($\sigma^+ \rightarrow c^+$) e absorver ($\sigma^- \rightarrow c^-$) partículas. Podemos simplificar esse estudo fazendo $f_L = -f_R = f$; no caso mais geral esses parâmetros poderiam ser independentes. O parâmetro f indica se o reservatório, em média, absorve mais partículas do que fornece. Por exemplo, se $f = 1$, o reservatório da esquerda tem polarização *up* e o da direita tem polarização *down*; na linguagem de férmions sem spins equivaleria à injeção de partículas pela esquerda e à absorção de partículas pela direita. Se $f = 0$, os reservatórios injetam e absorvem partículas com a mesma taxa. Portanto, fazendo essa parametrização, conseguimos controlar a atuação dos reservatórios apenas através de f . Nesse caso os operadores de Lindblad ficam da forma

$$L_{L,\pm} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{2}(1 \pm f)}\sigma_1^\pm \quad \text{e} \quad L_{R,\pm} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{2}(1 \mp f)}\sigma_N^\pm. \quad (4.17)$$

Uma derivação alternativa da equação mestra para esse sistema que vamos tratar é obtida através do método de interações repetidas. Esse método consiste em considerar a cadeia como um sistema isolado e fazemos com que os spins das extremidades interajam com dois spins extras. Esses spins extras são preparados no estado de Gibbs, cuja magnetização de cada um é dada por f_L e f_R , respectivamente. Eles interagem durante um intervalo de tempo τ com a cadeia. Ao final desse tempo, esses spin extras são removidos e outros dois novos spins, preparados no mesmo estado de Gibbs, voltam a interagir com a cadeia. Esse procedimento é repetido indefinidamente. No final fazemos o intervalo de tempo $\tau \rightarrow 0$ e obtemos a equação mestra na forma de Lindblad.

Esse processo de sempre forçar a interação com spins de magnetização fixa é uma simulação do papel realizado pelo banho, sendo que no limite em que o tempo de interação $\tau \rightarrow 0$, obtemos uma dinâmica idêntica à produzida por um reservatório Markoviano. Os detalhes desse método e a obtenção da equação mestra estão discutidos no apêndice C.

4.2.1 Correntes de spin e de energia

Ao conectar os reservatórios ao sistema de interesse, este é retirado do estado de equilíbrio e uma pergunta natural é: qual é o estado assintótico do sistema? Se os

reservatórios forem desbalanceados, isto é, $f_L \neq f_R$, eles vão induzir polarizações diferentes nas extremidades e o sistema não irá para um estado de equilíbrio. Ainda assim, no limite de tempos longos, o sistema chegará a um estado estacionário de não equilíbrio (NESS), de modo similar ao que ocorre quando ligamos dois reservatórios térmicos, um quente e um frio, às extremidades de uma barra. O regime estacionário atingido pela barra é de não equilíbrio, sendo que esse regime é caracterizado pela presença de fluxos, que nesse caso é um fluxo de calor, que não varia no tempo. No sistema que vamos tratar os desbalanço dos reservatórios geram uma corrente de spin e de energia.

Muitos trabalhos da literatura, tanto numéricos quanto analíticos, estão interessados em estudar propriedades do NESS. Por exemplo, há trabalhos que estudam o perfil de magnetização e as propriedades de transporte em modelos de spin com reservatórios magnéticos [55, 93, 101] e outros que estudam o perfil de ocupação para modelos de partículas como o de Hubbard, por exemplo, com reservatórios que permitem a troca de partículas [48, 52, 102]. Esse estado estacionário é obtido a partir da condição

$$\frac{d\rho_\infty}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L}[\rho_\infty] = 0, \quad (4.18)$$

onde $\rho_\infty = \rho(t \rightarrow \infty)$.

Para cadeias de spins descritas pelo modelo XXZ e acoplados a reservatórios magnéticos, pode-se estudar o perfil de magnetização dos spins, dado por $\langle \sigma_j^z \rangle = \text{tr}\{\sigma_j^z \rho_\infty\}$, bem como o comportamento das correntes de spin e de energia em função do parâmetro de anisotropia Δ (veja equação 4.12).

Como a magnetização total do sistema se conserva, ou seja, $[H, \sum_i \sigma_i^Z] = 0$, podemos usar a equação da continuidade para definir que a variação no tempo da magnetização de cada sítio depende do fluxo de magnetização que entra e sai desse sítio, isto é

$$\frac{d\langle \sigma_i^Z \rangle}{dt} = -\nabla \langle J_i^S \rangle = \langle J_{i-1}^S \rangle - \langle J_i^S \rangle, \quad (4.19)$$

onde $\langle J^S \rangle$ é o que chamamos de corrente de spin. Desenvolvendo o lado esquerdo da equação, obtemos

$$\frac{d\langle \sigma_i^Z \rangle}{dt} = 2\alpha \left(\langle \sigma_{i-1}^X \sigma_i^Y - \sigma_{i-1}^Y \sigma_i^X \rangle - \langle \sigma_i^X \sigma_{i+1}^Y - \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^X \rangle \right), \quad \text{para } 1 < i < N. \quad (4.20)$$

Comparando a equação 4.19 com a equação 4.20, temos que a corrente de spin pode ser escrita como

$$J_i^S = 2\alpha(\sigma_i^X \sigma_{i+1}^Y - \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^X). \quad (4.21)$$

Como dissemos anteriormente, no estado estacionário de não equilíbrio temos corrente, mas esta não depende do tempo e é a mesma para todos os sítios, ou seja, $\langle J_i^S \rangle = \text{tr}\{J_j^S \rho_\infty\} \equiv J^S$. Essa independência dos índices de sítio pode ser verificada pela

equação da continuidade, veja a equação 4.19; no NESS a magnetização de cada sítio não varia no tempo, logo $\langle J_{i-1}^S \rangle = \langle J_i^S \rangle$.

Passamos agora para corrente de energia. Reescrevendo o hamiltoniano do sistema como

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} \varepsilon_{i,i+1} = \sum_{i=1}^{N-1} h_{i,i+1} + b_{i,i+1}, \quad (4.22)$$

onde

$$\begin{aligned} h_{i,i+1} &= \alpha (\sigma_i^X \sigma_{i+1}^X + \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z, \\ b_{i,i+1} &= \frac{1}{2} [B_i \sigma_i^Z (1 + \delta_{i,1}) + B_{i+1} \sigma_{i+1}^Z (1 + \delta_{i,N})], \end{aligned} \quad (4.23)$$

e utilizando a equação da continuidade

$$\frac{d\langle \varepsilon_{i,i+1} \rangle}{dt} = -\nabla \langle J^E \rangle = \langle J_i^E \rangle - \langle J_{i+1}^E \rangle, \quad (4.24)$$

podemos obter a corrente de energia $\langle J_i^E \rangle$ e vemos que ela tem seguinte forma

$$\langle J_i^E \rangle = \langle J_i^{XXZ} \rangle + \langle J_i^B \rangle. \quad (4.25)$$

Sendo

$$\begin{aligned} \langle J_i^{XXZ} \rangle &= 2\alpha (\alpha (\sigma_{i-1}^Y \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^X - \sigma_{i-1}^X \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Y) \\ &+ \Delta_{i-1,i} \sigma_{i-1}^Z \sigma_i^X \sigma_{i+1}^Y - \Delta_{i-1,i} \sigma_{i-1}^Z \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^X \\ &+ \Delta_{i,i+1} \sigma_{i-1}^X \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Z - \Delta_{i,i+1} \sigma_{i-1}^Y \sigma_i^X \sigma_{i+1}^Z). \end{aligned} \quad (4.26)$$

e

$$\langle J_i^B \rangle = \frac{B_i}{2} (J_i^S + J_{i+1}^S). \quad (4.27)$$

Significa então que a corrente de energia tem contribuição de dois termos: o termo XXZ (J^{XXZ}), que depende somente da interação XXZ, mais especificamente vemos que depende explicitamente do produto das matrizes de Pauli envolvendo três sítios vizinhos, e o termo de campo (J^B) que depende da corrente de spin multiplicada pelo campo do sítio i em questão.

Assim como ocorre com a corrente de spin, no estado estacionário de não equilíbrio, a corrente de energia não varia no tempo e é homogênea ao longo da cadeia. Portanto, podemos retirar a dependência explícita do índice de sítio, ou seja, podemos definir $\langle J_i^E \rangle = \text{tr}\{\rho_\infty J_i^E\} \equiv J^E$.

A dedução de como obter as correntes de spin e energia está discutida com mais detalhes no apêndice C.

Através de simetrias associadas ao modelo em questão, é possível mostrar [53] que o termo XXZ da corrente de energia é nulo para uma cadeia homogênea, portanto nesse

caso $\langle J^E \rangle = B \langle J^S \rangle$, conforme as equações 4.25 e 4.27. Se o campo externo é nulo, não há corrente de energia. Esse resultado pode ser interpretado fisicamente da seguinte forma: por simplicidade considere $f = 1$, nessa configuração somente excitações de spins *up* são injetadas no sítio 1 e somente excitações de spin *down* são injetadas no sítio N ; a corrente de energia é uma contribuição das duas correntes, uma indo da esquerda para direita com spin *up* e outra da direita para esquerda com spin *down*. Energeticamente, essas duas correntes têm o mesmo peso; portanto, se não há nada que gere um desequilíbrio energético entre essas duas correntes, suas contribuições se anulam. No entanto, se ligamos um campo externo sobre a cadeia, temos um desbalanço energético dessas corrente, logo $\langle J^E \rangle \neq 0$.

A corrente de spin envolve um processo de conservação do número de excitações de spin uma vez que, ela pode ser escrita como

$$J_j^S = 4i(\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- - \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+). \quad (4.28)$$

Isso significa que a aplicação de um campo homogêneo não a afeta, pois o campo não cria nem destrói excitações de spin.

O termo da corrente de energia pode nos levar a pensar em calor. De fato, alguns trabalhos da literatura usam o termo calor ao invés de corrente de energia. Do ponto de vista da primeira Lei da Termodinâmica, isto estaria correto se nenhum trabalho fosse realizado sobre o sistema. Nesse caso corrente de energia corresponderia a calor. No entanto, um trabalho recente [103] chama atenção para esse ponto. Nesse trabalho, o autor argumenta que para sistemas acoplados a reservatórios que forçam uma polarização, que é o caso do sistema que estamos tratando, nós não temos um processo livre de trabalho, ou seja os reservatórios realizam trabalho sobre o sistema. Portanto, a corrente de energia tem contribuições de calor mais trabalho.

4.2.2 Obtenção do estado estacionário de não equilíbrio (NESS)

Vamos apresentar agora o método que nós utilizamos para encontrar o estado estacionário, descrito pela matriz densidade ρ_∞ . O NESS é obtido quando $d\rho_\infty/dt = 0$, isto é,

$$\frac{d\rho_\infty}{dt} = -i[H, \rho_\infty] + \mathcal{D}_L[\rho_\infty] + \mathcal{D}_R[\rho_\infty] \equiv \mathcal{M}[\rho_\infty] = 0. \quad (4.29)$$

Portanto, o estado estacionário é dado pelo *kernel* do operador linear \mathcal{M} . Para encontrá-lo, é conveniente “vetorizar” a matriz densidade ρ_∞ . Para isso vamos introduzir a transformação linear $vec(A)$, que converte uma matriz em um vetor. Precisamente, para

matrizes de dimensão 2×2 , temos

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \implies \text{vec}(A) = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

Para quaisquer três matrizes A , B e C , temos que seguinte identidade é válida

$$\text{vec}(ABC) = (C^T \otimes A)\text{vec}(B). \quad (4.31)$$

Podemos agora vetorizar a equação de Lindblad. Vamos definir o vetor da matriz densidade como $|\rho\rangle \equiv \text{vec}(\rho)$. Observe que na equação mestra (veja equações 4.10 e 4.11) temos termos do tipo $A\rho B$, $A\rho$ e ρB , onde os termos do tipo $A\rho$ e ρB podem ser escritos como $A\rho\mathbb{1}$ e $\mathbb{1}\rho B$, sendo $\mathbb{1}$ a matriz identidade. Portanto esses termos ficam da forma

$$\begin{aligned} \text{vec}(A\rho B) &= (B^T \otimes A)|\rho\rangle, \\ \text{vec}(A\rho) &= \text{vec}(A\rho\mathbb{1}) = (\mathbb{1} \otimes A)|\rho\rangle, \\ \text{vec}(\rho B) &= \text{vec}(\mathbb{1}\rho B) = (B^T \otimes \mathbb{1})|\rho\rangle. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Aplicando essa vetorização na equação de Lindblad, obtemos

$$\frac{d|\rho\rangle}{dt} = \mathcal{M}|\rho\rangle, \quad (4.33)$$

sendo que antes da vetorização, ρ e as matrizes que aparecem na equação mestra têm dimensão $m = 2^N \times 2^N$. Ao vetorizarmos a equação, temos que $|\rho\rangle$ é um vetor de dimensão $d = 2^{2N}$ e \mathcal{M} uma matriz de dimensão $d \times d$.

Utilizando as equações 4.10 e 4.11, temos que a matriz \mathcal{M} é da forma

$$\mathcal{M} = -i(\mathbb{1} \otimes H - H \otimes \mathbb{1}) + \sum_k L_k^* \otimes L_k - \frac{1}{2} \left(\mathbb{1} \otimes L_k^\dagger L_k + L_k^T L_k^* \otimes \mathbb{1} \right), \quad (4.34)$$

explicitando os operadores de Lindblad dos reservatórios que estamos considerando, obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{M} &= -i(\mathbb{1} \otimes H - H \otimes \mathbb{1}) \\ &+ \frac{\varepsilon}{4} \{ (1+f)(\sigma_1^+ \otimes \sigma_1^+ + \sigma_N^- \otimes \sigma_N^- \\ &+ \mathbb{1} \otimes \sigma_1^- \sigma_1^+ + \mathbb{1} \otimes \sigma^+ N \sigma_N^- + \sigma_1^- \sigma_1^+ \otimes \mathbb{1} + \sigma_N^+ \sigma_N^- \otimes \mathbb{1}) \\ &+ (1-f)(\sigma_1^- \otimes \sigma_1^- + \sigma_N^+ \otimes \sigma_N^+ \\ &+ \mathbb{1} \otimes \sigma_1^+ \sigma_1^- + \mathbb{1} \otimes \sigma^- N \sigma_N^+ + \sigma_1^+ \sigma_1^- \otimes \mathbb{1} + \sigma_N^- \sigma_N^+ \otimes \mathbb{1}) \}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

A evolução temporal do vetor $|\rho(t)\rangle$ é obtida através da solução da equação 4.33, que é da forma

$$|\rho(t)\rangle = e^{\mathcal{M}t} |\rho(0)\rangle. \quad (4.36)$$

Definindo $|x_k\rangle$ e $\langle y_k|$ como os autovetores normalizados à direita e à esquerda de \mathcal{M} , respectivamente, de tal modo que

$$\begin{aligned}\mathcal{M}|x_k\rangle &= \lambda_k|x_k\rangle, \\ \langle y_k|\mathcal{M} &= \langle y_k|\lambda_k, \\ \langle y_i|x_j\rangle &= \delta_{i,j}.\end{aligned}\tag{4.37}$$

\mathcal{M} pode ser escrito da forma $\mathcal{M} = \sum_{k=0}^{d^2-1} \lambda_k|x_k\rangle\langle y_k|$. Substituindo esse resultado na equação 4.36, temos

$$|\rho(t)\rangle = \sum_{k=0}^{d^2-1} e^{\lambda_k t}|x_k\rangle\langle y_k|\rho(0).\tag{4.38}$$

No início da nossa discussão, mostramos que o estado estacionário ρ_∞ é o *kernel* de \mathcal{M} se vetorizarmos a equação 4.29, ou seja, observamos que $|\rho_\infty\rangle$ é o autovetor de \mathcal{M} com autovalor nulo. Para a equação de Lindblad que estamos usando aqui, resultados gerais [104, 105] mostram que os demais autovalores são negativos, portanto podemos escrever o estado evoluído do sistema como

$$|\rho(t)\rangle = |\rho_\infty\rangle + \sum_{k=1}^{d^2-1} e^{\lambda_k t}|x_k\rangle\langle y_k|\rho(0),\tag{4.39}$$

uma vez que, como $\lambda_k < 0$, temos que no limite $t \rightarrow \infty$ o sistema vai para o estado estacionário de não equilíbrio.

Podemos então obter o NESS de duas formas: primeiro escrevemos \mathcal{M} e obtemos seu autovetor de autovalor nulo, via diagonalização exata; ou podemos fazer a evolução temporal e deixar o sistema evoluir para tempos longos. A dificuldade da primeira opção está em trabalhar com cadeias grandes, uma vez que a dimensão de \mathcal{M} cresce exponencialmente com o tamanho do sistema; já no segundo método há a possibilidade de simular sistemas maiores, via métodos numéricos do tipo t-DMRG, porém em algumas situações temos que deixar o sistema evoluir para tempos muito longos para garantir que chegou-se no estado estacionário.

Em nosso trabalho utilizamos as duas abordagens acima. O prof. Dr. Gabriel Landi da Universidade de São Paulo nos disponibilizou um código que realiza diagonalização exata para cadeias de tamanho até $N = 7$ sítios. Nosso colaborador Dr. Eduardo Mascarenhas nos disponibilizou um código que calcula a evolução temporal, via t-DMRG, no formalismo de *matrix product state* (MPS) [106, 107]. Como discutiremos mais adiante, estudamos retificação nesse tipo de sistema, para isso é necessário a introdução de assimetrias na cadeia. Em ambos os códigos nós incorporamos as devidas assimetrias.

4.3 Regimes de transporte para o modelo XXZ

Soluções exatas do NESS para $f = 1$ foram obtidas para o modelo XXZ [54, 55, 108]. Nesse limite ($f = 1$), o reservatório da esquerda força o primeiro sítio a ter uma polarização *up* ($L_1 = \sqrt{\varepsilon}\sigma_1^+$), enquanto que o da direita força o último sítio a ter uma polarização *down* ($L_4 = \sqrt{\varepsilon}\sigma_N^-$), L_2 e L_3 são nulos nesse regime de segundo as equações 4.15. A Figura (30), retirada da referência [55], apresenta o perfil de magnetização, painel (a), para uma cadeia com $n = 100$ sítios e a corrente de spin, painel (b), em função de n para três valores de Δ : um dentro da fase antiferromagnética $\Delta = 3/2$ (linha tracejada); outro no ponto de transição $\Delta = 1$ (linha pontilhada azul); e por fim dentro da fase sem *gap* $\Delta = 1/2$ (linha sólida preta). A curva vermelha apresenta a forma assintótica no limite do contínuo para $\langle \sigma_j^z \rangle = \cos\left(\frac{j-1}{n-1}\pi\right)$ e $\langle J \rangle = \pi\varepsilon^{-1}n^{-2}$ para $\Delta = 1$ e $\langle J \rangle = e^{-n \operatorname{arccosh}\Delta}$ para $\Delta = 3/2$.

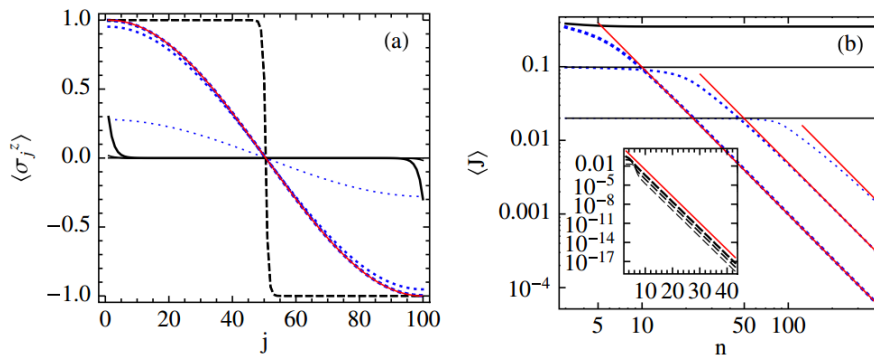


Figura 30 – Perfil de magnetização (a) e corrente de spin (b) para $\Delta = 3/2$ (linha tracejada), $\Delta = 1$ (linha azul pontilhada) e $\Delta = 1/2$ (curva sólida preta) para diferentes acoplamentos $\varepsilon = 1, 1/5, 1/25$ (curva mais espessa para a mais fina, respectivamente). Curvas vermelhas são expressões exatas. Figura retirada de [55].

Como foi discutido na seção 1.4, esse modelo apresenta uma fase sem *gap* para $|\Delta| < 1$ e uma fase antiferromagnética (com *gap*) para $\Delta > 1$. Podemos ver no painel (a) da Figura 30, que para cada uma dessas fases, o perfil de magnetização e a corrente de spin apresentam comportamentos diferentes. Para $|\Delta| < 1$, os spins próximos aos reservatórios apresentam magnetizações opostas, enquanto que os do *bulk* da cadeia apresentam $\langle \sigma_j^z \rangle = 0$; para $\Delta > 1$, metade dos spins tem polarização *up* e a outra metade tem polarização *down*; e no ponto de transição $\Delta = 1$ o perfil de magnetização apresenta um comportamento intermediário aos dois casos anteriores.

Pode-se associar o regime de transporte ao perfil de magnetização da cadeia, no painel (b) da Figura 30 observamos que a corrente se propaga balisticamente, isto é, não decai com o tamanho da cadeia, na fase sem *gap*. Para $\Delta \geq 1$, a corrente decai com o aumento do sistema, portanto seu transporte é difusivo, sendo que para $\Delta = 3/2$ o decaimento é exponencial.

A corrente de energia, assim como a corrente de spin, também apresenta distintos regimes de transporte de acordo com as fases do modelo. A Figura 31 foi retirada da referência [53], neste trabalho os autores fixam $f = 0.1$ e investigam o regime de transporte da corrente de energia em função de Δ para o modelo XXZ com campo externo (lembre-se que é necessário aplicar um campo externo para ter corrente de energia).

No painel (a) da Figura 31 temos a corrente de energia, que os autores chamaram de J^H , em função do tamanho da cadeia para $\Delta = 0.5$ e $\Delta = 0.9$; observe que a corrente não decai com o aumento do sistema, indicando assim o transporte balístico na fase Líquido de Luttinger. No painel (b) temos um gráfico log-log de $J^H/\Delta E$ (ΔE é a diferença de energia entre os sítios das extremidades da cadeia) em função do número de sítios para $\Delta = 1.2$ e $\Delta = 2.0$, observe que a corrente de energia decai com o tamanho da cadeia, sendo este comportamento uma assinatura de transporte difusivo na fase antiferromagnética.

Os respectivos perfis de energia, isto é, $\langle \varepsilon_{i,i+1} \rangle$ em função do sítio para uma cadeia de tamanho fixo, estão representados no painel (c) da Figura 31. Observe que para Δ na fase sem *gap* o perfil do *bulk* é aproximadamente *flat*, enquanto que para $\Delta > 1$ observa-se um gradiente em $\langle \varepsilon_{i,i+1} \rangle$. Pode-se então associar o perfil de energia com o regime de transporte. Se o transporte é difusivo, a lei de Fourier é seguida, isto é, $J^E = \kappa \nabla E$, sendo κ a condutividade e, para o caso discreto considerado, $\nabla E = \frac{\Delta E}{N-4}$.

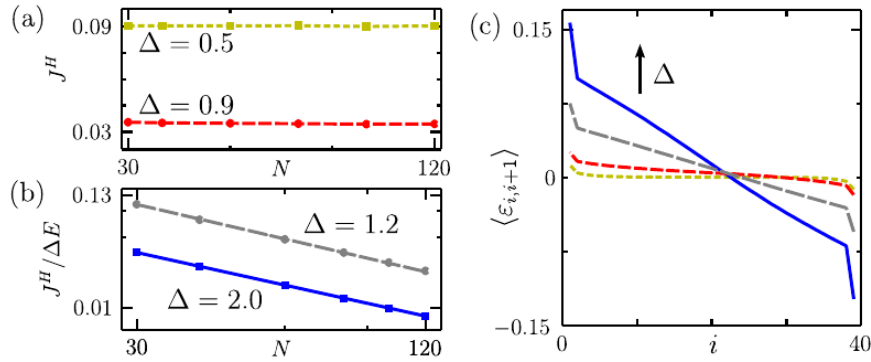


Figura 31 – Painel (a): corrente de energia J^H em função de N para $\Delta = 0.5$ (com campo externo $B = 1.0$) e $\Delta = 0.9$ (com campo externo $B = 0.5$); painel (b): gráfico log-log de $J^H/\Delta E$ em função do tamanho do sistema para $\Delta = 1.2$ e $\Delta = 2.0$; painel (c): respectivos perfis de energia em função dos sítios para uma cadeia de tamanho $N=40$. Figura retirada de [53].

Portanto, para uma cadeia homogênea e para o tipo de reservatório que estamos considerando, na fase sem *gap* tanto a corrente de spin quanto a de energia se propagam balisticamente, enquanto que para $\Delta > 1$ as correntes se propagam difusivamente.

5 Retificação em uma cadeia de spins com reservatórios nas extremidades

Apresentaremos neste capítulo os resultados do nosso segundo trabalho de Doutorado, a respeito de retificação das correntes de spin e de energia no modelo XXZ. Este trabalho foi realizado em colaboração com o professor Dr. Emmanuel Pereira, do Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais, e pode ser encontrado na referência [63].

Antes de descrevermos os detalhes técnicos relacionados ao desenvolvimento dessa parte do projeto, vamos enfatizar a importância do problema proposto. A procura de materiais retificadores é de amplo interesse teórico e experimental: um dos casos de maior sucesso e grande impacto para nossas vidas vem da invenção do transistor, cujo componente básico é o diodo. O diodo elétrico é um dispositivo retificador, cuja propriedade é permitir que a corrente elétrica tenha uma direção preferencial. Inspirado por tal sucesso, procura-se então dispositivos retificadores eficientes para a manipulação e controle das correntes de spin e/ou energia. Em fonônica, por exemplo, apesar da ausência de diodos térmicos eficientes, uma lista de análogos eletrônicos, tais como transistores térmicos, diodos térmicos, entre outros, tem sido teoricamente proposta [109]. É interessante notar que a maioria das propostas envolve uma cadeia de osciladores anarmônicos clássicos.

Há vários estudos sobre o transporte de calor envolvendo modelos clássicos [109–111]. Em particular, modelos de diodos térmicos são conhecidos, mas as propostas usuais, dadas pela união de 2 ou 3 partes com diferentes interações anarmônicas, apresentam pequeno fator de retificação e que cai rapidamente a zero com o aumento do tamanho do sistema. Por outro lado cadeias *graded* foram propostas como melhores retificadores [112–114]. Materiais *gradeds* são sistemas em que alguma estrutura muda gradualmente no espaço, no decorrer do capítulo ficará mais claro como podemos realizar esta conformação. Portanto, para sistemas clássicos, há essa competição entre a diminuição da retificação ao aumentar o sistema com o ganho da retificação com o uso da estrutura *graded* [114].

No presente contexto de buscar dispositivos cada vez menores somado com a escassez de resultados a respeito de retificação em sistemas quânticos de baixa dimensão, torna-se importante analisar tais efeitos em sistemas quânticos genuínos. O modelo XXZ apresenta-se como um bom candidato para investigar essas propriedades de transporte, uma vez que ele pode ser realizado experimentalmente e apresenta uma dinâmica extremamente rica, onde podemos ter simultaneamente corrente de spin e de energia.

Recentemente dois trabalhos observaram retificação na corrente de spin [60] e de

energia [59], em uma cadeia XXZ conectada a reservatórios magnéticos nas extremidades; este é exatamente o sistema que descrevemos no capítulo 4. Em ambos os casos os autores obtiveram soluções analíticas para cadeias com $N = 3$ e fizeram um estudo numérico para cadeias com mais sítios. Foi observado que, para obter retificação na corrente de spin, era necessário introduzir uma assimetria *graded* no campo magnético externo. O painel (a) da Figura 32 foi retirada da referência [60] e mostra a retificação na corrente de spin em função de Δ (para este caso Δ era uniforme ao longo da cadeia) para cadeias de tamanhos diferentes. O campo foi distribuído linearmente ao longo da cadeia entre $[-h, h]$ e fixou-se $f = 0.5$.

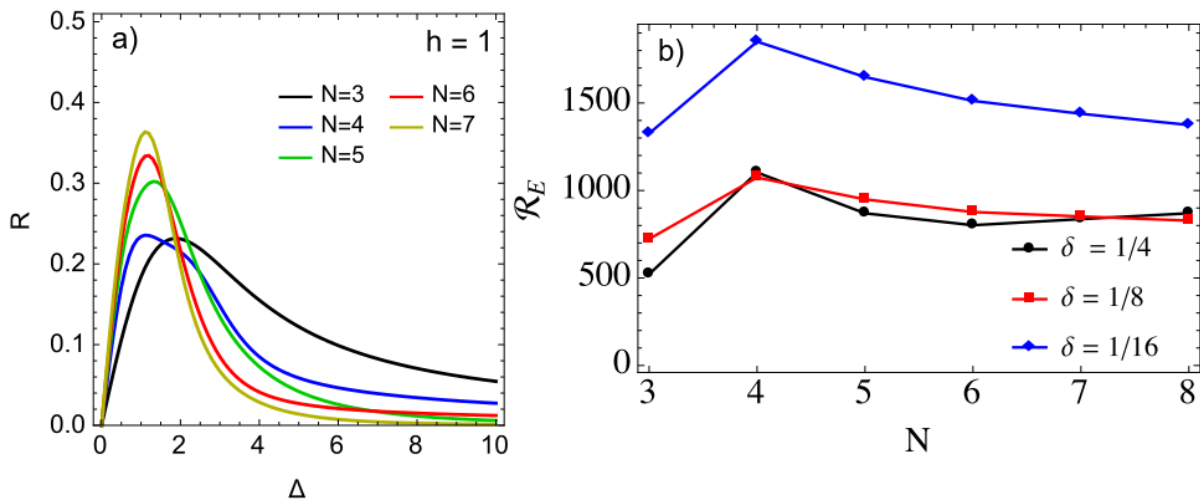


Figura 32 – Painel (a): retificação na corrente de spin em função de Δ para cadeias com tamanhos diferentes (N é o número de sítios), figura retida da referência [60]. Painel (b): retificação da corrente de energia em função de N para diferentes valores de assimetrias δ , figura retirada da referência [59].

Outro ponto sobre o qual eles chamaram atenção foi que, além de inserir assimetria no campo, é necessário ter $\Delta \neq 0$ para obter retificação. Ao considerarmos o mapeamento do modelo em um modelo de férmions sem spins, temos que o termo proporcional a Δ é um termo quártico, ou seja, anarmônico. Isso mostra que apenas acrescentar assimetrias não implica em retificação. Assim como no caso de osciladores clássicos, é necessário que o modelo seja anarmônico [115, 116].

Já na referência [59] os autores aplicaram um campo homogêneo ao longo da cadeia e introduziram uma assimetria *graded* em Δ , dessa forma conseguiram observar retificação na corrente de energia. O painel (b) da Figura 32 apresenta a retificação na corrente de energia em função do tamanho da cadeia, para o campo magnético externo $B = 0.1$ e $f = 1.0$. A assimetria no termo de interação foi distribuída linearmente entre $[\Delta - \delta, \Delta + \delta]$.

A partir dos ingredientes necessários para se obter retificação na corrente de spin e de energia, em nosso trabalho, estudamos ambas retificações simultaneamente. Para isso incorporamos assimetria tanto em $\Delta_{i,i+1}$ quanto no campo externo B_i .

Como discutimos no Capítulo 4, o espaço de Hilbert desse sistema cresce exponencialmente com o tamanho do sistema, portanto para obter o estado estacionário tivemos que fazer o uso de cálculo numérico. Analisamos cadeias com N até 9 sítios. Para sistemas com $N \leq 7$, realizamos diagonalização exata obtendo diretamente o NESS. No entanto, para cadeias maiores não conseguimos utilizar diagonalização exata, pois as matrizes a serem diagonalizadas têm dimensão da ordem de 2^{2N} (veja a seção 4.2.2). Nesse caso, consideramos a evolução temporal via t-DMRG, utilizando a linguagem de MPS, sendo que a dimensão de truncagem das matrizes foi $\chi = 150$, e o passo de tempo na decomposição de Trotter foi igual a 0.1. Nesse último caso, deixamos o sistema evoluir por um tempo longo o suficiente para atingir o estado estacionário. A condição que utilizamos para concluir que o NESS havia sido atingido foi a de que as correntes de spin e energia eram homogêneas ao longo da cadeia.

A fim de testar nossos códigos, o primeiro passo foi reproduzir os resultados das Ref. [59] e [60]. Feito isso passamos para o estudo do nosso projeto de pesquisa. Um detalhe que vale ressaltar é que, embora tenhamos usado dois códigos distintos, para todos os resultados que iremos apresentar, sempre confirmamos os resultados de t-DMRG para $N \leq 7$ com os cálculos de diagonalização exata.

Até o momento não definimos com detalhes o que é retificação. Vamos então explicar o que é retificação nesse tipo de sistema; em seguida apresentaremos nossos questionamentos neste trabalho; e por fim discutiremos nossos resultados.

5.1 Retificação

Como discutido na Capítulo 4, quando um sistema é colocado em contato com dois reservatórios desbalanceados, um fluxo de magnetização, que é associado a uma corrente de spin, aparece na cadeia, indo do reservatório de magnetização positiva para o de negativa, semelhante ao fluxo de calor entre dois reservatórios a temperaturas diferentes. Para tempos longos, o sistema atinge o estado estacionário de não equilíbrio e esse fluxo de magnetização passa a ser constante.

Se invertemos os reservatórios, o fluxo de magnetização também é invertido; essa inversão pode ser facilmente realizada nos cálculos invertendo-se o sinal de f nos operadores de Lindblad das equações (4.17). Para um sistema homogêneo, não existe nenhum motivo para a corrente se propagar com intensidade diferente de acordo com seu sentido de propagação, ou seja, inverter os reservatórios, ou equivalentemente inverter a cadeia, não modifica o valor da corrente, isto é, $J(-f) = -J(f)$, logo o fluxo é uma função ímpar de f . Dizemos que esse sistema não retifica.

No entanto, para sistemas que não são homogêneos, pode acontecer que $|J(-f)| \neq |J(f)|$; quando isso ocorre dizemos que há retificação. Isso significa dizer que em um

dado sentido, da esquerda para direita, por exemplo, há uma propagação de uma certa quantidade de corrente J ; ao fazer a inversão dos reservatórios, uma quantidade de corrente $J' \neq J$, considerando valores absolutos, flui no sentido contrário, como ilustrado na Figura 33. Portanto, quando há retificação, existe um favorecimento para a corrente se propagar em um dado sentido.

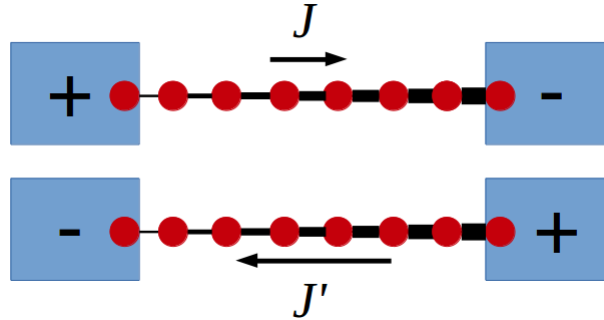


Figura 33 – Representação do processo de retificação. Definidos os reservatórios, uma corrente $J(f)$ aparece entre eles. Ao invertê-los uma corrente $J'(-f)$, de sentido oposto, surge. A retificação existe quando $|J(f)| \neq |J'(-f)|$.

O exemplo de dispositivo retificador mais comum que conhecemos atualmente é o diodo. O diodo perfeito permitiria a passagem de corrente em um sentido e impediria a passagem no sentido oposto. Recentemente surgiu uma proposta para um diodo perfeito de corrente de spin baseado no modelo XXZ [117]. Nesse trabalho os autores conectaram duas cadeias XXZ em fases distintas e observaram que, quando uma das cadeias está em um ponto específico na fase LL e a outra está em ponto específico na fase antiferromagnética, há passagem de corrente de spin em apenas um sentido.

Como a retificação está associada com a diferença das correntes de acordo com seu sentido de propagação, podemos quantificá-la da seguinte forma

$$R_\nu = 100 \frac{J^\nu(f) + J^\nu(-f)}{|J^\nu(f) - J^\nu(-f)|}, \quad (5.1)$$

sendo que J^ν pode ser tanto a corrente de spin (J^S) quanto a corrente de energia (J^E). Tal definição é similar àquelas utilizadas nas referências [59] e [60].

Note que para sistemas homogêneos $J^\nu(f) = -J^\nu(-f)$, portanto a retificação se anula. Para o caso em que a corrente se propaga em apenas um sentido (diodo perfeito), temos que essa função assume valores ± 100 . Vale destacar que de acordo com essa definição a retificação pode alcançar valores maiores (em módulo) do 100, isso acontece quando as correntes se propagam no mesmo sentido, independente de invertermos os reservatórios.

O sinal positivo na corrente indica que ela se propaga da esquerda para direita, se o sinal for negativo ela se propaga no sentido contrário. Portanto, se a retificação for

positiva, significa que a corrente flui com mais facilidade da esquerda para a direita e, se a retificação for negativa, a corrente tem mais facilidade de fluir da direita para a esquerda.

No caso especial em que a corrente é exatamente a mesma independente da inversão dos reservatórios, isto é, $J^\nu(f) = J^\nu(-f)$, temos que $R_\nu \rightarrow \infty$. Esse impressionante e surpreendente efeito foi observado para o sistema que estamos tratando. Sabemos que, se a cadeia for homogênea, o termo XXZ da corrente de energia é nulo [53], portanto que para que esse termo não se anule é necessário a presença de algum tipo de assimetria no sistema. Na referência [118], o autor mostrou rigorosamente que, se o campo externo for nulo e a assimetria em $\Delta_{i,i+1}$ for *graded*, a corrente de energia se propaga sempre no mesmo sentido, independe da inversão dos reservatórios; para esse fenômeno foi dado o nome de *one-way street*.

Para que haja retificação é necessária uma quebra de simetria; no entanto, foi demonstrado que para certos sistemas clássicos nem todo tipo de quebra de simetria implica em retificação [115]. Trabalhos recentes observaram que, em sistemas quânticos anarmônicos onde a quebra de simetria se deve a uma variação gradual de um dado parâmetro do sistema, a retificação se faz presente [116, 119]. Isso mostra que um bom modelo para estudar retificação em sistemas quânticos é o modelo XXZ, uma vez que esse termo anarmônico aparece naturalmente em sua estrutura.

Podemos sintetizar esses resultados a respeito da retificação na cadeia XXZ da seguinte forma:

- cadeia homogênea: para esse caso, o termo XXZ da corrente de energia é nulo, restando apenas o termo de campo. Quando não há campo externo, não temos corrente de energia nem retificação na corrente de spin. Se o campo externo é uniforme, temos corrente de energia porém continuamos sem retificação na corrente de spin. Se o campo externo é *graded*, temos retificação na corrente de spin e energia.
- cadeia com assimetria *graded* em $\Delta_{i,i+1}$: nesse caso o termo XXZ em $\langle J^E \rangle$ já não é mais nulo. Na ausência de campo externo, a corrente de energia se propaga em um único sentido pelo fenômeno de *one-way street*. Ao aplicar um campo uniforme, temos retificação na corrente de energia, porém a corrente de spin não retifica. Se o campo também é *graded*, temos retificação em ambas as correntes.

5.1.1 Assimetrias *graded*

Até o momento discutimos que para ter retificação é necessária a presença de assimetrias, no entanto nem todo tipo de assimetria gera retificação. Mais especificamente, o modelo XXZ apresentou retificação em ambas correntes quando uma assimetria *graded* foi incorporada a ele. Vamos agora especificar como incrementamos essas assimetrias no nosso trabalho.

O hamiltoniano que estamos usando é o XXZ com campo externo, que foi apresentado no capítulo 4

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} \left[\alpha \left(\sigma_i^X \sigma_{i+1}^X + \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Y \right) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right] + \sum_{i=1}^N B_i \sigma_i^Z,$$

onde σ_i^β ($\beta = X, Y, Z$) são as matrizes de Pauli no sítio i , α é a constante de troca, $\Delta_{i,i+1}$ é a constante de anisotropia, B_i é campo magnético externo atuando no sítio e N é o número de sítios da cadeia. Em nosso trabalho usamos $\alpha = 1$.

Podemos introduzir uma estrutura *graded* no modelo XXZ fazendo tanto o parâmetro anisotrópico $\Delta_{i,i+1}$ como o de campo externo B_i variar gradualmente dentro de algum intervalo $[-\omega, \omega]$, sendo que esse intervalo não precisa ser o mesmo para as duas quantidades.

Como $\Delta_{i,i+1}$ é um parâmetro interno do modelo, dizemos que sua assimetria é estrutural, isto é, é uma assimetria intrínseca ao sistema. Pensando que o modelo pode estar associado a algum tipo de dispositivo, essa assimetria é gerada durante a fabricação do dispositivo. Já no campo externo, a assimetria é extrínseca, ou seja, ela é gerada por mecanismos externos.

No caso da assimetria estrutural, escolhemos distribuir os parâmetros de duas formas: na assimetria delimitada, fixamos os valores de $\Delta_{i,i+1}$ para o primeiro e último *link* da cadeia e distribuímos os valores do parâmetro de anisotropia dos demais *links* linearmente entre esses limites, como explicitado abaixo

$$\Delta_{i,i+1} = [\Delta - \delta, \dots, \Delta, \dots, \Delta + \delta]; \quad (5.2)$$

já a outra assimetria é a que chamamos de acumulativa, nesse caso escolhemos o valor de $\Delta_{i,i+1}$ para o *link* no centro de cadeia e adicionamos δ para cada *link* à direita e subtraímos δ para cada *link* à esquerda, como mostra a relação

$$\Delta_{i,i+1} = [\dots, \Delta - 2\delta, \Delta - \delta, \Delta, \Delta + \delta, \Delta + 2\delta, \dots]. \quad (5.3)$$

Essas assimetrias em $\Delta_{i,i+1}$ têm impactos diferentes à medida que aumentamos o tamanho da cadeia: na primeira, $\Delta_{i,i+1}$ fica cada vez mais suave, enquanto que na última o sistema fica cada vez mais assimétrico; esperamos que as curvas das correntes sejam diferentes para cada caso.

Já a assimetria no campo B_i é do tipo acumulativa

$$B_i = [\dots, h - 2\zeta, h - \zeta, h, h + \zeta, h + 2\zeta, \dots], \quad (5.4)$$

ou seja, escolhemos um valor de campo h para o spin no centro da cadeia e somamos um valor ζ para cada spin à direita e subtraímos ζ para cada spin à esquerda.

A Figura 34 apresenta essa distribuição de parâmetros para uma cadeia com $N = 5$ sítios. No painel (a) temos a assimetria delimitada em $\Delta_{i,i+1}$, enquanto no painel (b) temos a assimetria do tipo acumulativa. Observe que a assimetria no campo externo é sempre do tipo acumulativa.

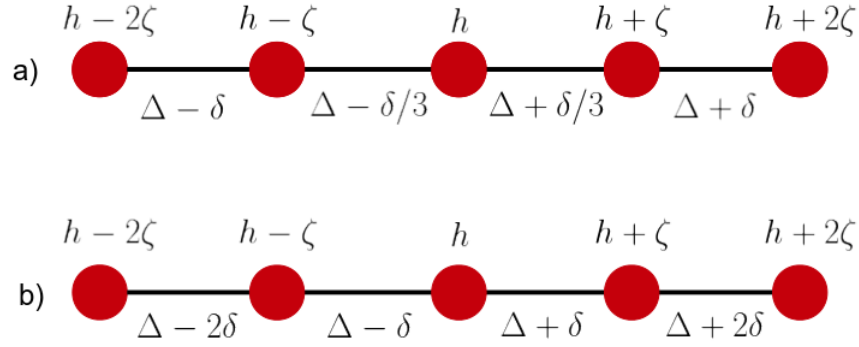


Figura 34 – Representação dos tipos de assimetrias utilizados no nosso sistema. O painel (a) considera a assimetria delimitada em $\Delta_{i,i+1}$, já no painel (b) temos a assimetria acumulativa. A assimetria no campo externo é sempre do tipo acumulativa.

O tipo de assimetria *graded* não é único. Podemos escolher a assimetria intrínseca crescendo quadraticamente ao longo da cadeia ou até mesmo exponencialmente, podemos mudar também a assimetria do campo, escolhendo a delimitada, por exemplo. Acreditamos que em ambos os casos observaremos retificação. No entanto, para cada tipo de assimetria incorporado teríamos que fazer uma nova análise. Portanto, como um primeiro estudo, começamos com apenas um tipo de assimetria. Essas outras formas ficam como questão em aberto até o momento, podendo ser investigada em trabalhos futuros.

O nosso objetivo, em colaboração com o prof. Emmanuel Pereira, foi estudar a retificação da corrente de spin e de energia simultaneamente no modelo XXZ. Mais especificamente, nós estávamos interessados em saber se é possível controlar e manipular as correntes bem como suas retificações através de mecanismos externos. Ou seja, investigamos se através da aplicação do campo externo podemos, por exemplo, forçar a corrente de spin e de energia a se propagarem em sentidos opostos.

Outro ponto que analisamos foi: o que acontece com as correntes e suas respectivas retificações quando a cadeia está localizada dentro da fase cujo regime de transporte é balístico ou difusivo? Comparamos esses dois casos com a situação em que metade da cadeia está na fase LL e a outra metade está na fase antiferromagnética.

5.2 Resultados: Controle e Manipulação da corrente de energia

Uma pergunta que surge e estamos interessados em responder é: uma vez construído um dispositivo com todas as assimetrias internas, é possível controlar e manipular a corrente

que passa por esse dispositivo através de mecanismos externos? No presente caso, estamos considerando que o modelo XXZ pode ser usado para descrever tal dispositivo. Em outras palavras, o que estamos querendo saber é, dadas as assimetrias em $\Delta_{i,i+1}$, conseguimos modificar o sentido preferencial das correntes de tal forma que podemos até mesmo inverter a retificação através da aplicação de um campo externo e suas assimetrias?

Note que essa pergunta tem grande interesse prático, pois podem existir situações em que seja interessante a passagem da corrente de spin e de energia no mesmo sentido, e situações onde essas correntes fluam em sentidos opostos. Ao invés de criar um dispositivo para cada função, queremos controlar e manipular essas correntes, via um agente externo, de modo que em um único dispositivo todos esses casos possam ser realizados, sendo o agente responsável por esse controle o campo magnético.

A definição de retificação que estamos usando, veja equação 5.1, é adequada para descrever essas inversões, porque ela pode assumir valores positivos e negativos. Podemos ter retificação da corrente de spin positiva e, ao mesmo tempo, a da corrente de energia negativa. Esse é um exemplo de inversão de retificação.

Vimos que o comportamento das correntes de spin e de energia, bem como os regimes de transporte, para o caso homogêneo [53, 55] são sensíveis aos parâmetros ε , f , $\Delta_{i,i+1}$ e B_i . No nosso caso assimétrico, ainda temos que acrescentar mais dois parâmetros, δ e ζ . Veremos que as correntes serão muito sensíveis à escolha de parâmetros. Portanto, por simplicidade, focamos somente em algumas situações específicas em que julgamos que os resultados são mais interessantes e mais claros. Com o objetivo de simplificar nossa análise e diminuir o número de parâmetros livres, fixamos $\varepsilon = 1$ e $|f| = 0.448$, deixando que somente $\Delta_{i,i+1}$ e B_i , bem como suas assimetrias, interfiram no comportamento das correntes.

Intuitivamente temos que, quanto maior o valor de f , mais desbalanceados estão os reservatórios, portanto maiores seriam os valores das correntes que se propagam na cadeia. No entanto nem sempre isso é verdade. A Figura 35 apresenta a corrente de spin, painel (a), e a corrente de energia, painel (b), em função de f para uma cadeia de $N = 7$ sítios sem a presença de campo externo, para $\Delta = 4$ e $\delta = 0.15$, sendo a assimetria utilizada a acumulativa. Quando $f = 0$, os reservatórios são idênticos, logo as correntes são nulas; quando $f = 1$, eles estão maximamente desbalanceados e, ao contrário do que pensávamos, as correntes têm intensidades muito baixas. Esse fenômeno já foi observado para a corrente de spin, neste mesmo modelo que estamos tratando, porém sem assimetrias, e recebeu o nome de *negative differential conductivity* (NDC) [120]. Portanto, como estamos interessados em estudar o controle e manipulação das correntes, escolhemos um valor de f intermediário, de modo que suas intensidades não sejam tão pequenas.

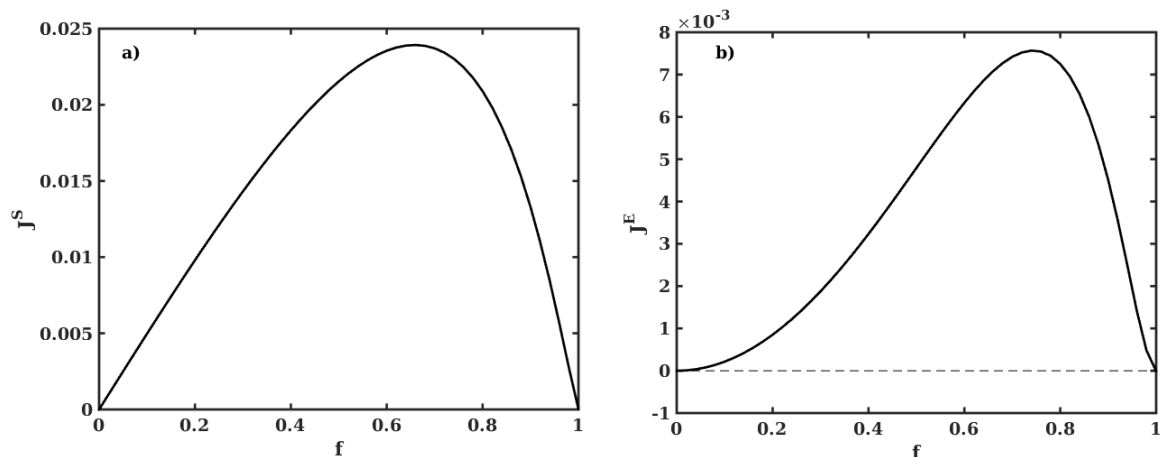


Figura 35 – (a) Corrente de spin e (b) corrente de energia em função de f para $N = 7$, com $\Delta = 4$, $\delta = 0.15$, $h = 0.0$ e $\zeta = 0.0$.

5.2.1 Comportamento em função do parâmetro de anisotropia

Para ilustrar o nosso cenário vamos analisar uma cadeia com $N = 7$ sítios. Fizemos um estudo envolvendo os dois tipos de assimetrias em $\Delta_{i,i+1}$ e vimos que os resultados para os dois casos são bem similares. Portanto, mostraremos aqui os resultados correspondentes à assimetria acumulativa, a discussão detalhada para a assimetria delimitada está no apêndice D.

Inicialmente, fixamos o campo externo aplicado à cadeia como nulo e então analisamos a dependência das correntes com Δ , que é o valor de anisotropia no centro da cadeia e a partir do qual $\Delta_{i,i+1}$ está distribuído (veja a equação 5.3). Do ponto de vista experimental, dispositivos construídos assim têm apenas assimetrias internas. Em seguida, ligamos o campo externo e observamos suas modificações nas correntes bem como nas retificações.

Na Figura 36 nós apresentamos os resultados para as correntes de spin e de energia em função de Δ , sendo que fixamos $\delta = 0.15$, $h = 0.0$ e $\zeta = 0.0$. No painel (a), para a corrente de spin, a curva contínua representa a corrente com $f = 0.448$, enquanto que a curva tracejada é a corrente ao invertermos os reservatórios, isto é, $f \rightarrow -f$. Note a simetria das correntes em relação ao eixo y , isto é, $\langle J^S(f) \rangle = -\langle J^S(-f) \rangle$, portanto não há retificação. Como discutimos anteriormente, esse resultado era esperado e foi provado rigorosamente que, uma vez que não há assimetria no campo externo, a retificação na corrente de spin é nula [60], ainda que exista assimetria em Δ .

No painel (b) da Figura 36 temos a corrente de energia em função de Δ . Note que aqui observamos o fenômeno de *one-way street*, isto é, as duas curvas da corrente de energia, uma para $f = 0.448$ e outra para $f = -0.448$, coincidem. Isso significa que a corrente de energia flui no mesmo sentido independente da configuração dos reservatórios, nesse caso a corrente de energia é uma função par de f , isto é, $\langle J^E(f) \rangle = \langle J^E(-f) \rangle$. Já

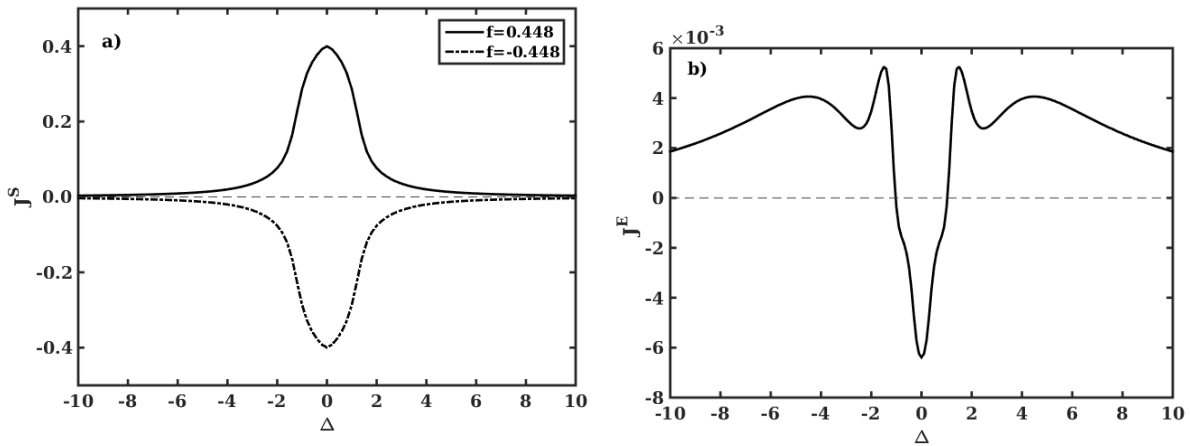


Figura 36 – (a) Corrente de spin e (b) corrente de energia em função de Δ para $N = 7$ sítios, com $\delta = 0.15$, $h = 0.0$, $\zeta = 0.0$ e $|f| = 0.448$.

discutimos esse efeito anteriormente e isso ocorre devido ao campo externo ser nulo [118]. Lembre-se que a corrente de energia tem duas contribuições: uma do termo XXZ e outra do termo de campo. O termo de campo é dado pela corrente de spin, que depende do sinal de f , multiplicada pelo campo externo; como o campo é nulo sobra apenas o termo XXZ. Este termo depende da assimetria em Δ , se essa assimetria for nula ele se torna nulo. No entanto, observamos que ele independe do sinal de f quando o campo externo é homogêneo, de modo que podemos inverter os reservatórios e ainda assim seu valor é o mesmo.

Estes nossos resultados para campo nulo são uma confirmação numérica de resultados já conhecidos na literatura [59, 60]. Esses trabalhos se baseiam em simetrias que aparecem na equação mestra de Lindblad, usada na evolução temporal da cadeia XXZ, para discutir a respeito da existência ou inexistência de retificação no sistema em questão.

Um outro ponto que podemos observar é que a corrente de energia, na ausência de campo, é uma função par de Δ , isto é, $\langle J^E(\Delta) \rangle = \langle J^E(-\Delta) \rangle$. No entanto a dependência da corrente com os parâmetros Δ e δ não é trivial. Por exemplo, para o regime de parâmetros que escolhemos, em $\Delta = \pm 1.5$ a corrente apresenta um valor positivo, isso significa que ela se propaga da esquerda para a direita, enquanto que, em $\Delta = 0$, ela se propaga no sentido contrário, veja o painel (b) da Figura 36.

Uma outra simetria que conseguimos notar na corrente de energia foi em relação a δ . Observamos que a corrente é uma função ímpar de δ para campo nulo, isto é, $\langle J^E(\delta) \rangle = -\langle J^E(-\delta) \rangle$. A Figura 37 mostra a corrente de energia para $\Delta = 4$ e campo nulo em função de δ . Note também que o sentido de propagação da corrente não é dado pelo gradiente de Δ , ou seja, $\delta > 0$ não implica em corrente positiva.

Estes resultados a respeito de simetrias são bem interessantes, pois, apesar de estarmos tratando de um sistema assimétrico, conseguimos observar, sob certas condições,

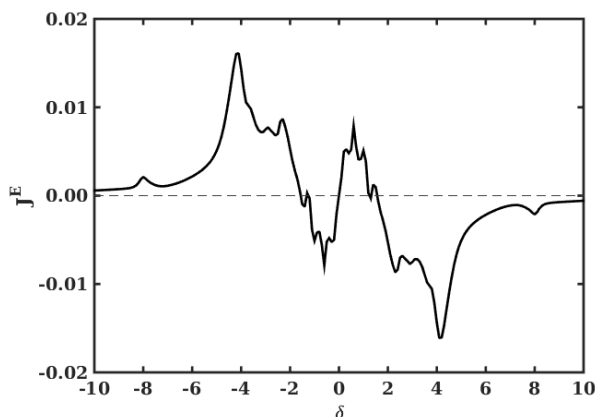


Figura 37 – Corrente de energia em função de δ para uma cadeia com $N = 7$ sítios e $\Delta = 4$, $h = 0$ e $\zeta = 0$.

simetrias nas correntes. Um ponto que reforça a importância destes resultados é a grande dificuldade de encontrar soluções analíticas e até mesmo inferir comportamento para esse modelo com todos esses parâmetros que estamos lidando; note o quão sensíveis estas curvas são ao variarmos apenas um parâmetro.

Nosso próximo passo é ligar o campo magnético externo. O simples fato de ligarmos o campo já é suficiente para as curvas de corrente de energia se separarem. Isso acontece porque agora o termo de campo, $\langle J_i^B \rangle$, não é mais nulo. Como esse termo depende da corrente de spin, ora ele terá uma contribuição positiva, ora ele terá uma contribuição negativa. Portanto nesse caso o sinal de f se torna relevante.

Ligar um campo homogêneo ao longo da cadeia consegue alterar a corrente de energia, no entanto a corrente de spin não varia. Para conseguir modificar a corrente de spin temos que acrescentar assimetria no campo, aqui definida por ζ . Portanto, para ver mudança nas duas correntes, aplicamos um campo externo $h = -0.94$ com assimetria $\zeta = -2.0$ e construímos novamente as curvas de corrente de spin e de energia em função de Δ para essa mesma cadeia de $N = 7$ sítios, como pode ser visto na Figura 38.

No painel (a) da Figura 38 vemos que, devido à assimetria no campo, a corrente de spin mudou sua forma completamente, quebrando a simetria em relação ao eixo y apresentada na Figura 36, ou seja, agora $\langle J^S(f) \rangle \neq -\langle J^S(-f) \rangle$, implicando em retificação na corrente de energia. Já no painel (b) vemos que as curvas da corrente de energia que estavam sobrepostas na Figura 36 agora se separaram. A curva contínua representa a corrente para $f = 0.448$, enquanto que a curva tracejada é para $f = -0.448$.

Ao comparar os painéis (a) das Figuras 36 e 38, vemos que o valor de Δ no qual as correntes de spin apresentam um valor máximo mudou. Para campo nulo, o máximo era em $\Delta = 0$, independente do sentido de propagação; já ao ligarmos o campo, a corrente passou a ter um máximo em $\Delta \approx -3.0$ em um sentido de propagação, enquanto que no

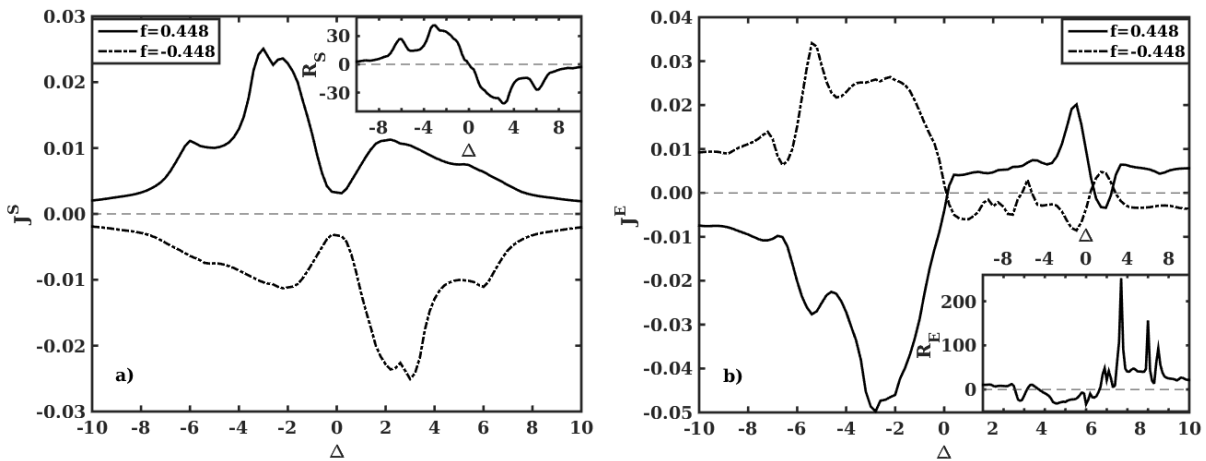


Figura 38 – Corrente de spin, painel (a), e corrente de energia, painel (b), em função de Δ para $N = 7$ sítios, com $\delta = 0.15$, $h = -0.94$ e $\zeta = -2.0$. Nos *insets* estão as retificações das respectivas correntes.

sentido contrário de propagação passou a ter um máximo em $\Delta \approx 3.0$. Já a corrente de energia apresenta uma mudança ainda maior: a simetria em Δ foi completamente quebrada, seu comportamento é ainda mais complexo comparado ao caso com campo nulo, compare os painéis (b) das Figuras 36 e 38. Em outras palavras, o uso de um campo externo assimétrico foi suficiente para alterar as correntes e além disso fez surgir uma retificação, até então inexistente, na corrente de spin.

É interessante notar que, para certos valores de Δ , as correntes de spin e de energia se propagam em sentidos contrários para uma mesma configuração de reservatórios: para f positivo (negativo) a corrente de spin é positiva (negativa), enquanto que a corrente de energia é negativa (positiva). Como a corrente de spin independe de h , podemos notar que o seu sentido de propagação depende exclusivamente da configuração dos reservatórios, ou seja, quando f é positivo a corrente é positiva, para f negativo a corrente inverte o sentido. Isso significa que nós podemos controlar, e até mesmo inverter, o sentido da corrente de energia via aplicação de campo magnético externo. Esse é um exemplo claro de um procedimento que permite a manipulação de correntes via mecanismos externos.

Como não temos mais simetria ao longo do eixo y observamos retificação em ambas as correntes. Os *insets* da Figura 38 mostram a retificação calculada a partir das respectivas correntes em função de Δ . Note que para $\Delta = 4$, por exemplo, observamos a inversão na retificação da corrente de spin e de energia, isto é, para esse Δ em específico a corrente de spin flui com mais facilidade da direita para a esquerda, enquanto que a corrente de energia flui com maior facilidade da esquerda para a direita. Vemos que o responsável pela retificação na corrente de spin e a inversão entre as retificações das duas correntes foi a aplicação de um campo externo assimétrico.

Enfatizamos aqui nossa estratégia. O sentido de propagação da corrente de spin

depende exclusivamente da configuração dos reservatórios (quando f é positivo a corrente é positiva, para f negativo a corrente inverte o sentido), no entanto a corrente de energia tem um termo que depende do campo magnético, veja equação 4.25. Portanto podemos ajustar um campo de tal forma que consigamos manipular o sentido de propagação da corrente de energia.

Para cada valor de Δ temos uma cadeia diferente. Vamos agora analisar a dependência da corrente de energia com o campo h para um Δ específico. A Figura 39 apresenta $\langle J^E \rangle$ e sua respectiva retificação (*inset*) para $\Delta = 4$ em função de h , sendo que mantivemos os demais parâmetros, isto é, $\delta = 0.15$ e $\zeta = -2.0$.

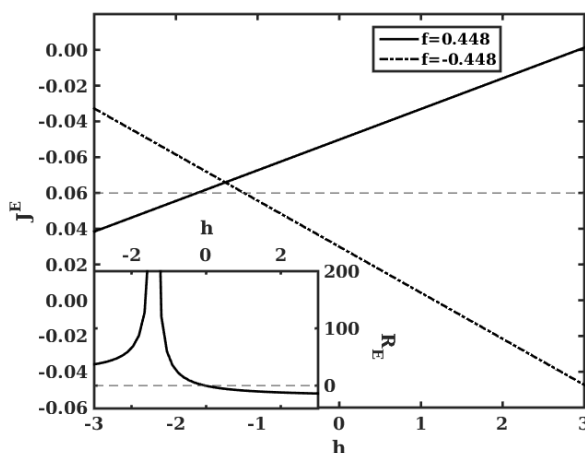


Figura 39 – Corrente de energia em função de h , com $\Delta = 4$, $\delta = 0.15$ e $\zeta = -2.0$, para uma cadeia com $N = 7$ sítios. A retificação na corrente de energia está apresentada no *inset*.

Notamos que ao variar o campo podemos facilmente mudar o sentido de propagação da corrente de energia. Vemos que, se a cadeia está submetida a um campo $h = -3.0$ e $f = 0.448$, por exemplo, a corrente de energia se propaga para a esquerda. Porém, se aumentamos o campo para $h = 3.0$, por exemplo, conseguimos inverter o sentido de propagação da corrente. Note que, além de inverter o sentido da corrente, conseguimos inverter o sentido da retificação. Ou seja, para um certo valor de campo h a corrente de energia flui com mais facilidade em um sentido, enquanto que se mudarmos esse campo a corrente passa a se propagar com mais facilidade no sentido contrário.

Podemos concluir então que é possível controlar e manipular a corrente de energia, bem como sua retificação, sem mudar a estrutura interna do dispositivo. Conseguimos, via mecanismos externos, obter corrente de spin e de energia se propagando em sentidos contrários, uma vez que $\langle J^S \rangle$ independe de h .

5.2.2 Mudança no grau de assimetria

Até o momento analisamos os casos das cadeias de tamanho fixo, com $N = 7$ sítios. Vamos agora investigar situações em que o grau de assimetria intrínseca do sistema muda, esse é o caso quando alteramos o tamanho da cadeia e o parâmetro de anisotropia está distribuído segundo a assimetria acumulativa. Para esse tipo de assimetria à medida que a cadeia cresce o sistema fica cada vez mais assimétrico. Variamos o tamanho do sistema de $N = 3$ até $N = 9$ sítios; por limitações numéricas (discutidas no apêndice D) não conseguimos resultados confiáveis além disso.

Como mencionamos anteriormente, cada valor de Δ nos gráficos de corrente corresponde a uma cadeia diferente, já que esse é um parâmetro intrínseco do material, ou seja, mudando este parâmetro estamos mudando o dispositivo. Diferentemente da análise anterior, vamos agora fixar o valor de Δ e analisar as curvas de correntes para tamanhos de cadeias distintos. Escolhemos $\Delta = 4$, pois é para esse valor que a corrente de energia é máxima para uma cadeia de $N = 3$ sítios e campo nulo, veja a discussão feita no apêndice D. Os demais parâmetros são mantidos como $\delta = 0.15$, $h = -0.94$ e $\zeta = -2.0$ e a assimetria no campo continua da mesma forma, conforme a equação 5.4. Seguiremos o mesmo protocolo: inicialmente vamos analisar o caso na ausência de campo externo e em seguida vamos ligar o campo assimétrico e comparar as curvas.

A Figura 40 apresenta as correntes de spin, painéis (a) e (c), e de energia, painéis (b) e (d), em função do tamanho do sistema para cadeias com até $N = 9$ sítios. Os painéis (a) e (c) correspondem às correntes na ausência de campo e os painéis (b) e (d) correspondem às correntes com campo assimétrico. As respectivas retificações estão indicadas nos *insets*. As curvas contínuas representam a corrente quando $f = 0.448$ e as curvas tracejadas representam a corrente quando invertemos os reservatórios, $f = -0.448$.

Observe que todos os fenômenos que observamos na ausência de campo continuam valendo independente do valor de N . Não temos retificação na corrente de spin, pois $\langle J^S(f, N) \rangle = -\langle J^S(-f, N) \rangle$, e o fenômeno *one-way street*, em que a corrente de energia se propaga no mesmo sentido independente do sinal de f , se mantém. Dessa forma, $\langle J^E(f, N) \rangle = \langle J^E(-f, N) \rangle$ independentemente do tamanho da cadeia.

Nos painéis (c) e (d) temos as correntes de spin e energia, respectivamente, na presença de campo assimétrico. Observe que na presença do campo a corrente de spin decai com o aumento do sistema. No entanto, ela decai de forma diferente de acordo com seu sentido de propagação, seu decaimento é maior quando se propaga da esquerda para a direita comparado com o caso em que ela se propaga no sentido contrário. É exatamente por ter essa diferença na intensidade das correntes de acordo com seu sentido de propagação que observamos retificação. A retificação está apresentada no *inset* de cada gráfico, observe que, apesar dela oscilar, o seu valor não diminui para estes tamanhos de

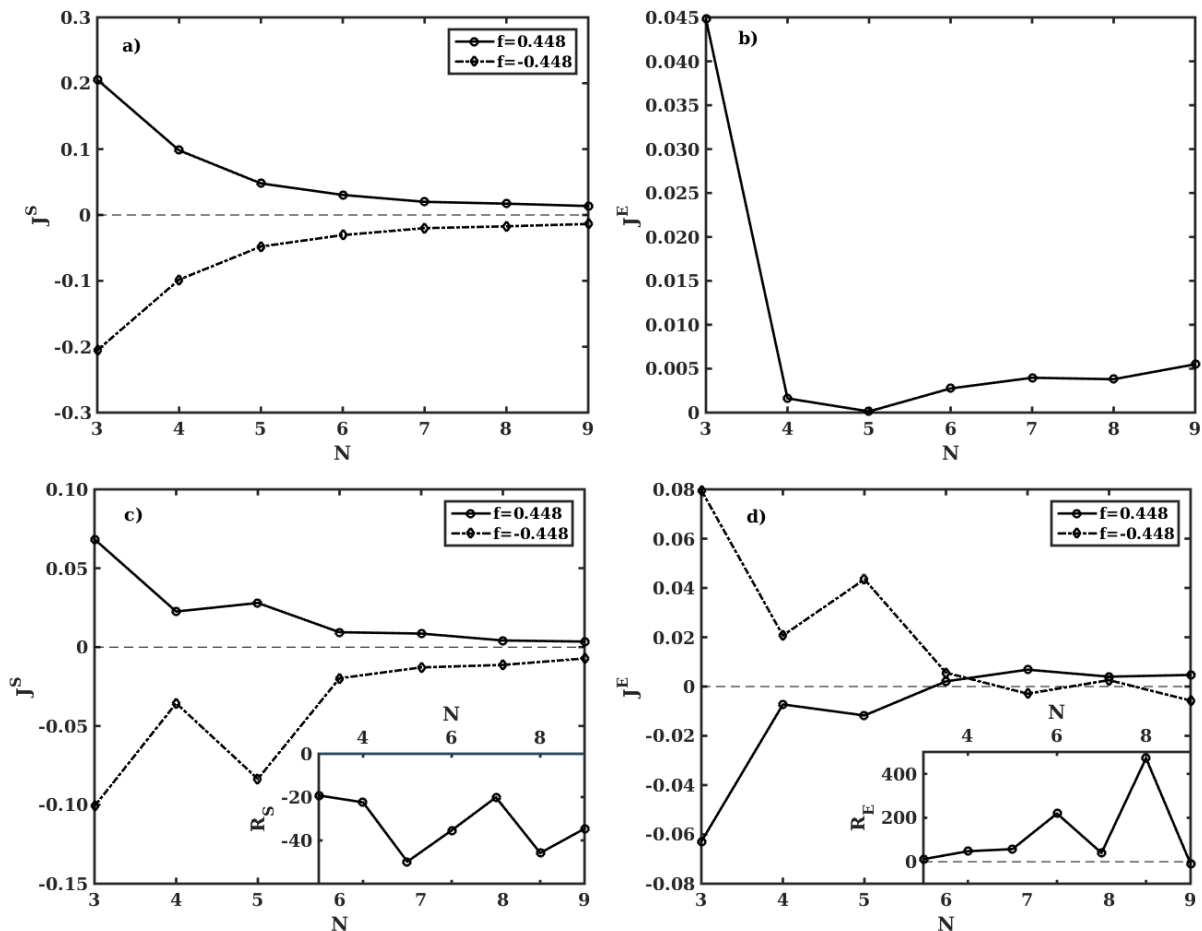


Figura 40 – Correntes de spin, painéis (a) e (c), e energia, painéis (b) e (d), em função de N para $\Delta = 4$ e $\delta = 0.15$. Nos painéis (a) e (b) temos que $h = 0.0$ e $\zeta = 0.0$. Nos painéis (c) e (d) temos $h = -0.94$ e $\zeta = -2.0$. Nos *insets* temos as retificações das respectivas correntes.

sistemas que estamos considerando.

Já a corrente de energia apresenta um comportamento que chama a atenção: ela diminui à medida que o sistema aumenta, no entanto ao aumentar a cadeia de $N = 5$ para $N = 7$ observamos que ela inverte seu sentido de propagação. Para uma dada configuração de reservatórios, definido por $f = 0.448$, para uma cadeia com até $N = 5$ sítios a corrente de energia se propaga da direita para a esquerda. Porém, em uma cadeia de tamanho maior, submetida ao mesmo campo, acoplada aos mesmos reservatórios, a corrente de energia passa a se propagar no sentido contrário. A única alteração aqui foi o aumento da cadeia, o campo externo continua o mesmo.

Esse fenômeno de inversão de corrente com o tamanho do sistema já foi observado para corrente de spin neste mesmo modelo, porém os reservatórios forçavam magnetização fora do eixo z [121].

Observamos aqui inversões de corrente de energia por meio de dois mecanismos. O primeiro é através de um mecanismo externo, onde é possível controlar e manipular

a corrente com grande liberdade. Isto é, dada um material com assimetria estrutural conectado a reservatórios magnéticos desbalanceados, podemos modificar suas correntes originárias via campo magnético. O segundo tipo de inversão é, fixado o campo externo, observamos que a corrente de energia inverte seu sinal ao aumentarmos o tamanho do sistema quando este apresenta uma assimetria do tipo acumulativa.

A inversão da corrente de energia com o aumento da cadeia foi observada para o caso da assimetria acumulativa. Acreditamos que esse efeito está associado com a assimetria na interação. Sabemos que, para esse tipo de assimetria, à medida que aumentamos o número de sítios tornamos o sistema cada vez mais assimétrico. Logo isso nos leva a pensar que existe um valor de N no qual o sistema se torna tão assimétrico que a corrente de energia inverte seu sentido de propagação. Ou seja, o que estamos querendo mostrar aqui é que ao aumentar a assimetria estrutural, isto é, aumentar δ , conseguimos inverter o sentido de $\langle J^E \rangle$ mantendo fixo os reservatórios.

Para checar se essa inversão tem origem na assimetria intrínseca, calculamos as correntes de energia e spin em função de δ , para uma cadeia com $N = 7$ sítios, o mesmo campo assimétrico $h = -0.94$ e $\zeta = -2.0$ e $\Delta = 4$. Partimos da situação em que não há assimetria estrutural, ou seja, $\delta = 0.0$, e aumentamos a assimetria até $\delta = 0.25$.

A Figura 41 apresenta um gráfico das correntes de energia e de spin, painéis (a) e (b), respectivamente, em função de δ . As curvas contínuas representam as correntes para $f = 0.448$ e as curvas tracejadas indicam as correntes quando invertemos os reservatórios. As respectivas retificações estão indicadas nos *insets* de cada painel.

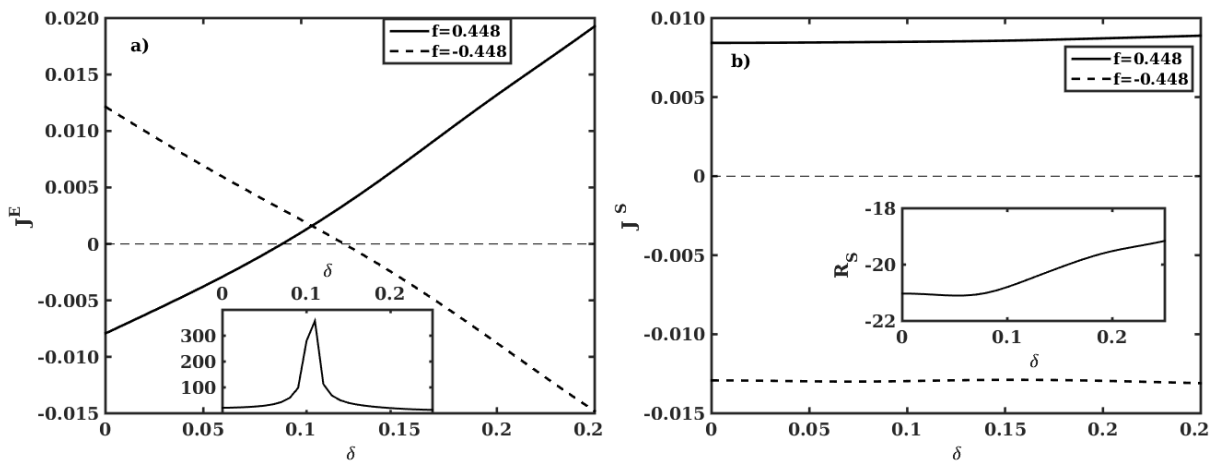


Figura 41 – Corrente de energia, painel (a), e corrente de spin, painel (b), em função de δ em uma cadeia com $N = 7$ sítios, $h = -0.94$ e $\zeta = -2.0$ e $\Delta = 4$. As retificações das respectivas correntes estão apresentadas nos *insets*.

Observe que, como esperávamos, a corrente de energia inverte seu sinal de propagação com o aumento da assimetria intrínseca do sistema. Para $\delta = 0.05$, por exemplo, a corrente flui da direita para esquerda (para $f = 0.448$), enquanto que para $\delta = 0.25$ ela

inverte seu sentido. Já a corrente de spin, painel (b) da Figura 41, essencialmente não muda com o aumento de δ , note que a retificação, apresentada no *inset*, pouco se altera.

5.2.2.1 Dependência da inversão de corrente h e ζ para cadeias com $N = 5$ e com $N = 7$ sítios

Na seção anterior discutimos a dependência da inversão com a assimetria intrínseca do sistema, isto é, assimetria em Δ . Porém, dada a grande quantidade de parâmetros que estamos lidando, não podemos negligenciar a dependência dos outros termos nesse efeito. Para o jogo de parâmetros que estamos usando, parte da cadeia tem campo com sinal positivo e parte da cadeia tem campo com sinal negativo. Uma pergunta que surge é: será que essa mudança no sinal do campo é importante para o efeito de inversão das correntes?

A fim de investigar esse ponto, fixamos $\Delta = 4$, $\delta = 0.15$ e variamos o valor de h mantendo fixa a assimetria $\zeta = -2.0$ do campo. Variamos o campo no intervalo $h = [-2.0; 2.0]$ com o passo de 0.1 e computamos a corrente de energia, o termo XXZ e a corrente de spin para cada valor de h . Para entender essa dependência comparamos as correntes entre cadeias de tamanhos $N = 5$ e $N = 7$ sítios, pois foram para esses tamanhos que observamos a inversão, veja o painel (d) da Figura 40.

Como o campo magnético varia ao longo da cadeia, o termo XXZ também varia de sítio para sítio, pois somente dessa forma a corrente de energia se mantém uniforme. Para nossa análise não faz diferença qual sítio estamos observando, uma vez que a corrente de energia é a mesma ao longo da cadeia. Portanto, o valor do termo XXZ que apresentamos é de apenas um sítio. O que muda de um sítio para outro são os valores numéricos do termo XXZ e do campo B_i , porém a dependência com h é a mesma.

A Figura 42 apresenta as curvas das correntes de energia para uma cadeia com $N = 5$, painéis (a) e (b), e $N = 7$ sítios, painéis (c) e (d). Os painéis (a) e (c) correspondem ao caso em que $f = 0.448$, enquanto que os painéis (b) e (d) correspondem à situação em que invertemos os reservatórios ($f = -0.448$). Em cada painel a curva contínua indica a corrente de energia, a curva tracejada a corrente de spin e a curva pontilhada o termo XXZ.

Essas curvas são referentes à corrente de energia no sítio $i = 2$, isto é

$$\langle J_2^E \rangle = \langle J_2^{XXZ} \rangle + B_2 \langle J_2^S \rangle, \quad (5.5)$$

onde

$$B_2 = h - \frac{(N-3)}{2} \zeta. \quad (5.6)$$

Fazer uma mudança em h significa que estamos aumentando ou diminuindo o campo de todos os sítios na mesma quantidade. Note que, como havíamos discutido, tanto a corrente de spin quanto o termo XXZ independem desse *shift* no campo, essas

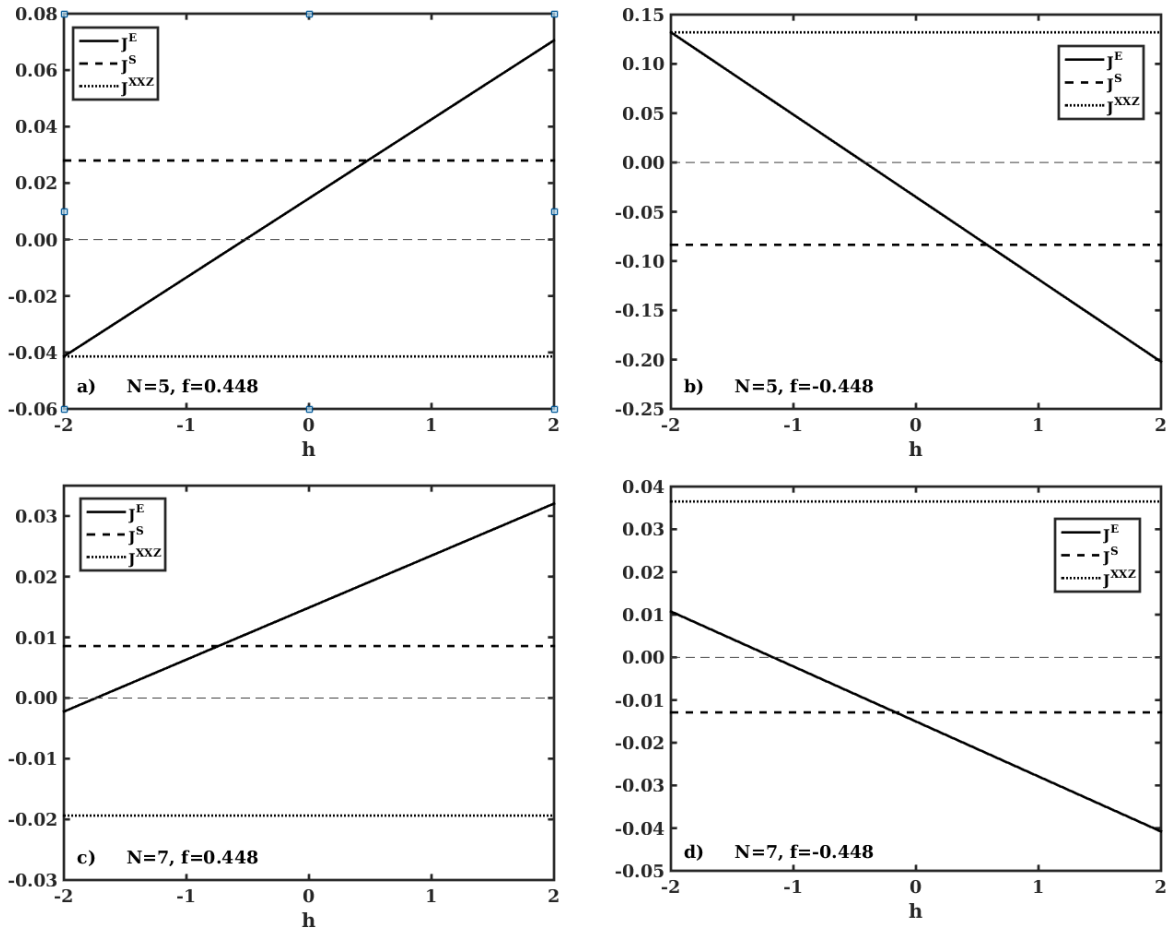


Figura 42 – Corrente de energia (curva contínua), corrente de spin (curva tracejada) e o termo XXZ (curva pontilhada) em função de h com $\zeta = -2.0$, $\Delta = 4.0$ e $\delta = 0.15$. Painéis (a) e (b) são para uma cadeia com $N = 5$ sítios e painéis (c) e (d) para uma cadeia com $N = 7$ sítios. As correntes para $f = 0.448$ estão representadas nos painéis (a) e (c), enquanto que o caso de $f = -0.448$ está representado nos painéis (b) e (d).

quantidades são sensíveis ao gradiente do campo ao longo da cadeia, isto é, a ζ . Como $\langle J^{XXZ} \rangle$ e $\langle J^S \rangle$ apresentam esse comportamento, temos que $\langle J^E \rangle$ varia linearmente com h , o que pode ser diretamente observado através das equações (5.5) e (5.6).

Para o jogo de parâmetros que estamos usando, precisamos aumentar muito o valor de h para que todos os sítios da cadeia tenham o mesmo sinal de campo. Nesse limite, temos que $\langle J^E \rangle \approx B \langle J^S \rangle$. Nesse caso, não observamos inversão da corrente de energia em função do tamanho da cadeia, pois o sentido da corrente de spin depende somente da configuração dos reservatórios. Isso também pode ser observado nos gráficos da Figura 42, vemos que assintoticamente as correntes para cadeias com $N = 5$ e $N = 7$ sítios têm o mesmo sentido de propagação.

Para observar em que região de h há possibilidade de inversão, temos que comparar os painéis (a) com (c) e (b) com (d) da Figura 42. Devemos ficar atentos às curvas contínuas e observar quando os sinais delas invertem, isto é, em que situação uma delas

assume valores positivos enquanto a outra assume valores negativos, tudo isso para o mesmo f .

Fazendo essa comparação, notamos que, para que haja inversão da corrente de energia com o aumento do sistema, é necessário que parte da cadeia tenha campo com sinal negativo e parte da cadeia tenha campo com sinal positivo. Mais especificamente vemos que, para o regime de parâmetros com que estamos lidando, só conseguimos observar essa inversão das correntes com o tamanho da cadeia para $-1.2 < h < -0.5$. Falta agora analisarmos a dependência com ζ .

Assim como foi feito no caso anterior, variamos o parâmetro de interesse, que no caso é o ζ , e fixamos os demais parâmetros do hamiltoniano. Fizemos $\Delta = 4$, $\delta = 0.15$, $h = -0.94$ e variamos $\zeta = [-7.0; 7.0]$ com o passo de 0.1. Calculamos as correntes de energia e de spin e o termo XXZ para cadeias com $N = 5$ e $N = 7$ sítios.

A Figura 43 apresenta os gráficos dessas quantidades para $N = 5$ sítios, painéis (a) e (b), e para $N = 7$ sítios, painéis (c) e (d). Os painéis (a) e (c) representam as correntes para $f = 0.448$, enquanto que nos painéis (b) e (d) $f = -0.448$. A curva contínua indica a corrente de energia, a tracejada a corrente de spin e a pontilhada o termo XXZ.

Diferentemente do caso anterior, o termo XXZ e a corrente de spin são funções de ζ , isto é, $\langle J^{XXZ} \rangle = \langle J^{XXZ} \rangle(\zeta)$ e $\langle J^S \rangle = \langle J^S \rangle(\zeta)$, portanto pela equação (5.5) temos que a corrente de energia não tem uma dependência linear com ζ . Mais do que isso, pelos gráficos vemos que as correntes têm uma dependência não trivial com a assimetria do campo, sendo difícil obter uma expressão analítica dessas curvas.

Apesar do comportamento não trivial das correntes, podemos observar claramente a variação da corrente de spin com a assimetria do campo ζ . Observe que, mesmo ela variando bastante, ela não inverte seu sentido de propagação para uma dada configuração de reservatórios. Esse gráfico é mais uma confirmação de que quem define o sentido da corrente de spin são os reservatórios.

Para encontrar a região onde ocorre a inversão da corrente de energia com o tamanho da cadeia, devemos comparar as curvas pretas de cada gráfico para o mesmo f . Estamos em busca da região em que as correntes de energia têm sentidos opostos entre as cadeias com $N = 5$ e $N = 7$. Fazendo isso, vemos que para as regiões de $-2.3 < \zeta < -1.4$ e $-1.1 < \zeta < -0.4$, observamos inversão na corrente de energia com tamanho do sistema. Assim como no caso anterior, essa região é muito pequena.

A visão geral que nós temos é que esse comportamento das correntes é muito sensível à escolha dos parâmetros. Vimos que tanto h quanto ζ devem estar dentro de uma faixa de valores para ser possível a inversão da corrente de energia com o tamanho dos sistema. Isso a priori pode parecer muito específico, mas devemos lembrar que o campo é um parâmetro externo, que pode ser controlado com mais facilidade, permitindo

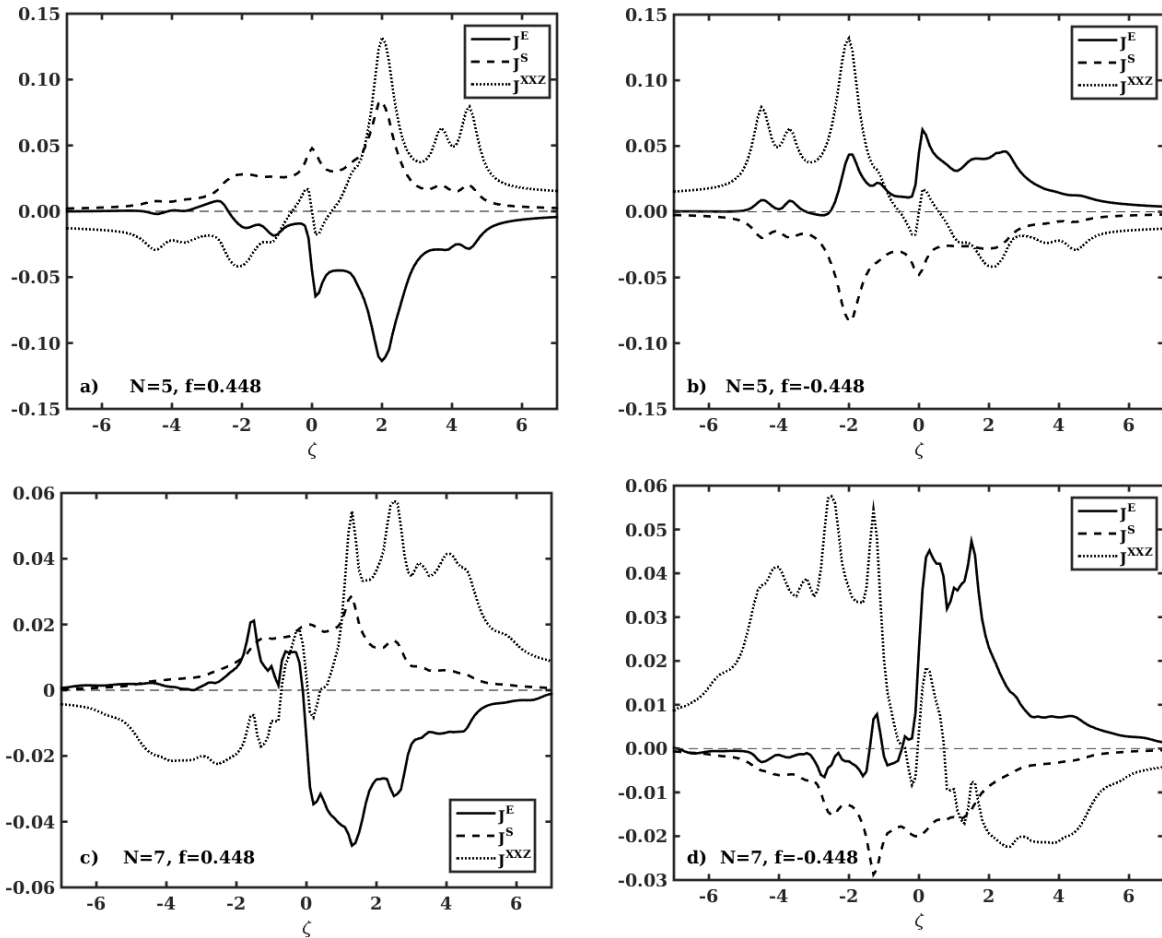


Figura 43 – Corrente de energia (curva contínua), corrente de spin (curva tracejada) e o termo XXZ (curva pontilhada) em função de ζ com $h = -0.94$, $\Delta = 4.0$ e $\delta = 0.15$. Painéis (a) e (b) são para uma cadeia com $N = 5$ sítios e painéis (c) e (d) para uma cadeia com $N = 7$ sítios. As correntes para $f = 0.448$ estão representadas nos painéis (a) e (c), enquanto que o caso de $f = -0.448$ está representado nos painéis (b) e (d).

a obtenção desses fenômenos com uma escolha apropriada dos parâmetros.

5.3 Cadeias em “fases” diferentes

Sabemos que o modelo XXZ para spin-1/2 apresenta as fases Líquido de Luttinger ($|\Delta| < 1$) e antiferromagnética ($\Delta > 1$). Como discutimos, veja a seção 4.3, estas duas fases apresentam regimes de transporte balístico e difusivo, respectivamente, tanto para corrente de spin [55] quanto para corrente de energia [53]. Um ponto interessante de investigar é como ficam as correntes nessas fases quando incorporamos assimetrias no sistema. Vale ressaltar que o uso do termo “fases” não é preciso, por isso o usamos entre aspas, pois deveríamos tomar o limite termodinâmico, o que não é feito aqui. Quando nos referimos às fases balística e difusiva, estamos considerando os resultados de que a cadeia encontra-se em região de parâmetros cujo regime de transporte é balístico ou difusivo no limite termodinâmico.

Para garantir que a cadeia esteja somente dentro de uma fase utilizamos a assimetria delimitada em $\Delta_{i,i+1}$. Escolhemos os seguintes valores: $\Delta = 0.5$, para a fase balística; $\Delta = 1.5$, para a fase difusiva. O grau de assimetria é tomado como $\delta = 0.25$, com esse valor conseguimos garantir que a cadeia inteira esteja dentro de uma única fase. Para evitar o fenômeno de *one-way street* escolhemos o campo externo como uniforme, dado por $h = 0.1$ e $\zeta = 0.0$. Como estamos interessados em estudar o comportamento das correntes em cada fase, não é necessário colocar uma assimetria no campo, isso nos forneceria um parâmetro a mais para analisar. Por fim definimos os reservatórios com $|f| = 0.5$.

A Figura 44 apresenta o gráfico da corrente de spin em função de N para $\Delta = 0.5$, curva contínua, e para $\Delta = 1.5$, curva tracejada. Essas curvas representam o caso de $f = 0.5$. Não estamos mostrando a corrente referente à inversão dos reservatórios, pois, como não há assimetria no campo, ela apresenta o mesmo módulo, mudando apenas o sentido de propagação. Portanto, não há retificação na corrente de spin.

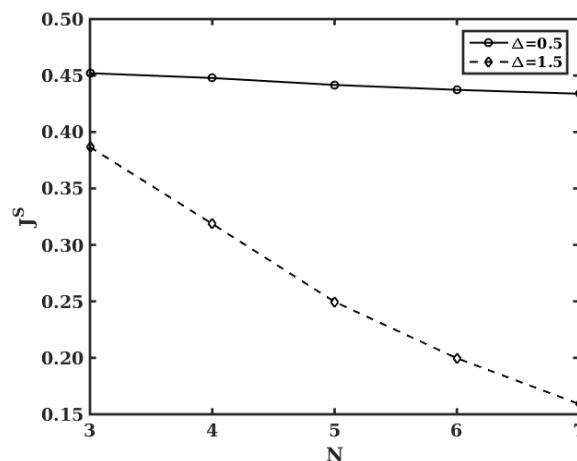


Figura 44 – Corrente de spin em função do tamanho da cadeia N para $f = 0.5$, $\delta = 0.25$, $h = 0.1$ e $\zeta = 0.0$. Na curva contínua o parâmetro de anisotropia está centrado em $\Delta = 0.5$, enquanto que na curva tracejada está centrado em $\Delta = 1.5$. Foi usada assimetria delimitada em $\Delta_{i,i+1}$.

Sabemos que, para uma cadeia homogênea, no regime de transporte difusivo a corrente diminui com o aumento do sistema, enquanto que para o caso balístico ela se mantém constante [55]. De acordo com nossos resultados, vemos que em ambos os casos, a corrente de spin diminui com o tamanho do sistema. No entanto, o decaimento na fase difusiva, curva tracejada da Figura 44, é muito maior do que na fase balística, curva contínua. Vale ressaltar que o tamanho de sistema que estamos tratando ainda é muito pequeno para inferir algum tipo de comportamento que possa ser característico da fase.

A Figura 45 apresenta a corrente de energia em função de N no painel (a). As curvas pretas representam $\Delta = 0.5$, enquanto que as curvas vermelhas $\Delta = 1.5$. A curva contínua indica $f = 0.5$, já a curva pontilhada é para $f = -0.5$. Como esperávamos

conseguimos evitar o fenômeno de *one-way street* simplesmente ligando um pequeno campo homogêneo na cadeia.

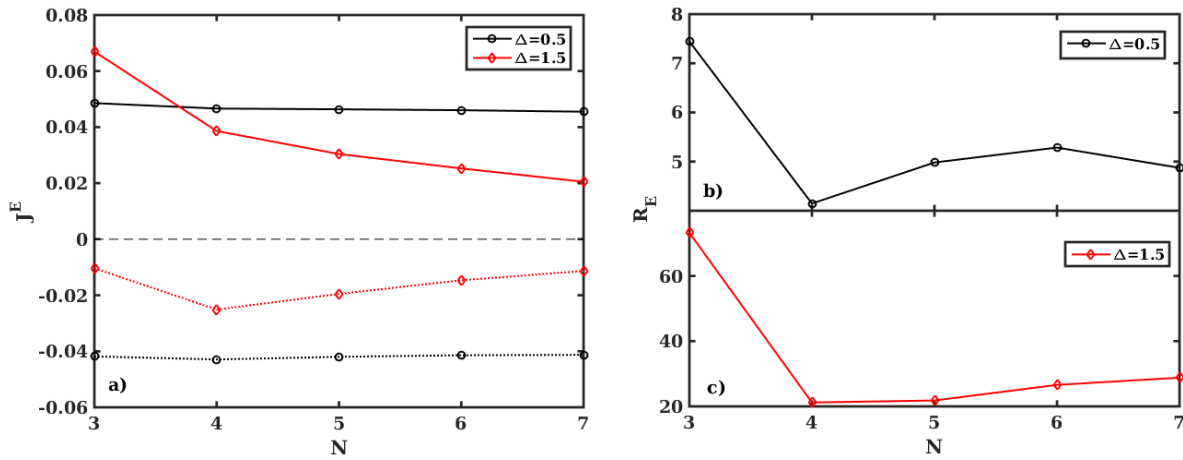


Figura 45 – Corrente de energia, painel (a), em função do tamanho da cadeia N para $\delta = 0.25$, $h = 0.1$ e $\zeta = 0.0$. Na curva preta o parâmetro de anisotropia está centrado em $\Delta = 0.5$, enquanto que na curva vermelha está centrado em $\Delta = 1.5$. A linha contínua é para $f = 0.5$ e a tracejada representa a inversão dos reservatórios. Foi usada assimetria delimitada em $\Delta_{i,i+1}$. As retificações para $\Delta = 0.5$ e $\Delta = 1.5$ estão apresentadas nos painéis (b) e (c), respectivamente.

Assim como foi observado para a corrente de spin, a corrente de energia tem um pequeno decaimento na fase balística, curvas pretas, enquanto que na fase difusiva, curvas vermelhas, o decaimento da corrente de energia com o tamanho do sistema é maior, veja o painel (a) da Figura 45. No entanto esses decaimentos são diferentes de acordo com o sinal de f . É justamente por ter essa diferença que temos retificação na corrente de energia.

Diferentemente da corrente de spin, a corrente de energia apresenta retificação, devido à assimetria em Δ . As retificações na corrente de energia quando o parâmetro de anisotropia está centrado em $\Delta = 0.5$ e em $\Delta = 1.5$, estão indicadas nos painéis (b) e (c) da figura 45, respectivamente. Apesar da corrente de energia diminuir pouco na fase balística, sua retificação é pequena. Na fase difusiva observamos que a retificação é muito maior e se mantém praticamente constante com o aumento do sistema.

Para essa análise temos o seguinte cenário: na fase balística a corrente de energia é favorecida, porém apresenta baixo fator de retificação; na fase difusiva $\langle J^E \rangle$ decai com o tamanho do sistema, como é característico desse tipo de transporte, no entanto mantém um fator de retificação. Note que essas conclusões foram tiradas para sistemas de até $N = 7$ sítios.

Após analisar o comportamento das correntes com a cadeia “dentro” de cada fase, vamos analisar agora a situação em que o parâmetro de anisotropia está centrado no ponto de transição entre as duas fases, ou seja, vamos ver como as correntes se comportam quando $\Delta = 1.0$. Nesse caso, metade da cadeia está na fase balística e a outra metade

está na fase difusiva. A Figura 46 apresenta os gráficos da corrente de spin, painel (a), e corrente de energia, painel (b), em função de N . As curvas contínuas correspondem a $f = 0.5$ e a curva tracejada representa $f = -0.5$.

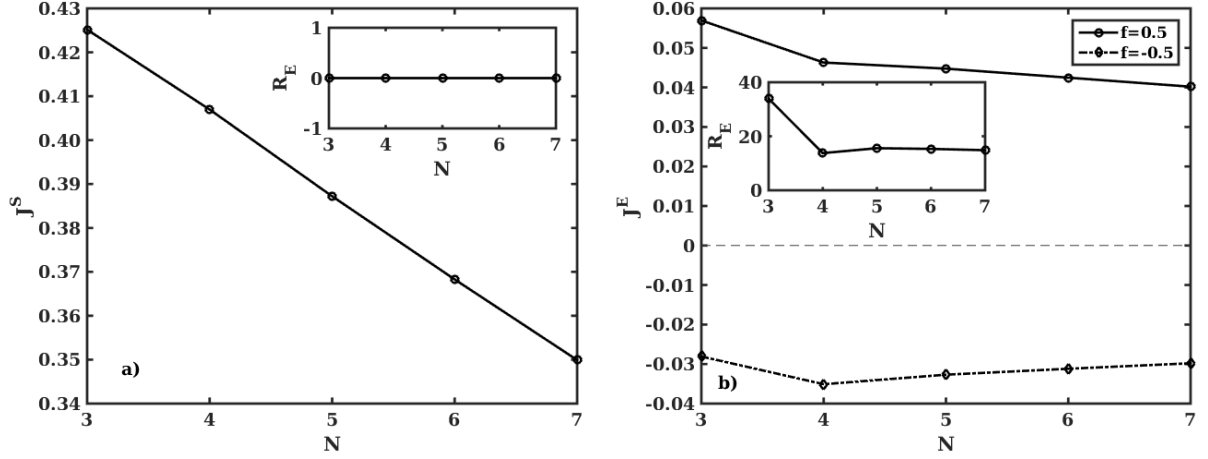


Figura 46 – Corrente de spin, painel (a), e energia, painel (b), em função do tamanho da cadeia N , $\delta = 0.25$, $h = 0.1$ e $\zeta = 0.0$. O parâmetro de anisotropia está centrado em $\Delta = 1.0$. Foi usada assimetria delimitada em $\Delta_{i,i+1}$. As retificações estão indicadas nos *insets* de cada painel.

Observe que o comportamento das correntes é uma mistura do que observamos na fase balística e difusiva. A corrente de spin, painel (a) da Figura 46, tem um decaimento com N , praticamente linear, maior em comparação ao da fase balística e bem menor do que visto na fase difusiva, compare com os painéis (a) e (b) da Figura 44. A corrente de energia, painel (b) da Figura 46, também apresenta essas mesmas assinaturas das duas fases: tem um decaimento maior do que o da fase balística e menor do que o da fase difusiva.

As respectivas retificações estão representadas nos *insets*. Note, que como esperado, a corrente de spin não apresenta retificação; já a retificação na corrente de energia tem um leve decaimento e depois se mantém constante com N .

5.3.1 Assimetria acumulativa

Podemos fazer esse mesmo estudo utilizando a assimetria acumulativa. Vamos analisar a cadeia com parâmetro Δ centrado nos mesmos valores de anisotropia, isto é, $\Delta = 0.5$ e $\Delta = 1.5$. Os demais parâmetros são os mesmos: $\delta = 0.25$, $h = 0.1$, $\zeta = 0.0$ e $|f| = 0.5$. Diferentemente do caso anterior, à medida que o sistema cresce, temos mistura de fases, isto é, $\Delta_{i,i+1}$ de uma parte da cadeia está na fase balística, enquanto $\Delta_{i,i+1}$ da outra parte está na fase difusiva.

A Figura 47 apresenta a corrente de spin para $\Delta = 0.5$, curva contínua, e para $\Delta = 1.5$, curva tracejada. Pelo mesmo motivo do caso anterior, mostramos apenas as

correntes para $f = 0.5$. Novamente observamos que, em ambos os casos, a corrente de spin decai com o aumento do sistema e há ausência de retificação. Para $\Delta = 1.5$, o decaimento é muito maior do que para $\Delta = 0.5$. Em ambos os casos há mistura de fases para $N \geq 5$, logo não podemos dizer que uma cadeia se encontra em uma fase difusiva ou balística. O que diferencia as cadeias é que em uma Δ está centrado na fase balística e na outra está centrado na fase difusiva. Embora o sistema seja pequeno para inferir comportamento de fase, temos um indício de que, quando Δ está centrado na fase difusiva, o decaimento de J^S com N é maior do que quando ele está centrado na fase balística. No entanto é necessário aumentar o tamanho do sistema para tirar melhores conclusões.

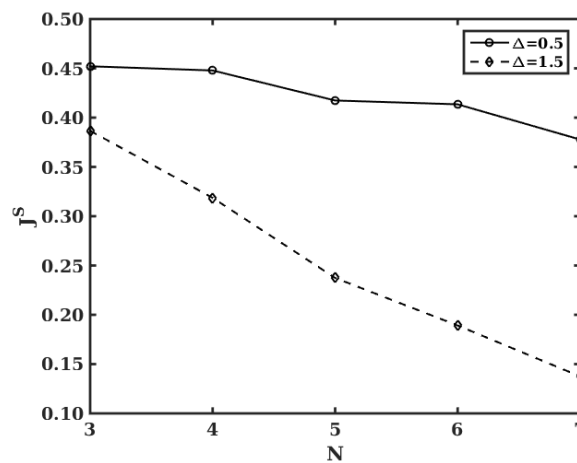


Figura 47 – Corrente de spin em função do tamanho da cadeia N para $f = 0.5$, $\delta = 0.25$, $h = 0.1$ e $\zeta = 0.0$. Na curva contínua Δ está centrado em $\Delta = 0.5$ e na curva tracejada em $\Delta = 1.5$. Foi usada assimetria acumulativa em $\Delta_{i,i+1}$.

Comparando as curvas pretas das Figuras 44 e 47, vemos que a corrente de spin quando a cadeia está puramente na fase balística, Figura 44, decai mais lentamente em relação ao caso de Δ centrado na fase difusiva, Figura 47. No momento em que a cadeia passa a entrar na fase difusiva, seu decaimento se intensifica; isso indica que essa mistura prejudica ainda mais o comportamento do tipo balístico, fazendo com que a corrente decaia mais rapidamente com o tamanho do sistema. Além da mistura das fases, temos que o sistema está se tornando cada vez mais assimétrico. É provável que este aumento na assimetria dificulte cada vez mais o transporte balístico.

Fazendo a mesma comparação entre as curvas tracejadas das Figuras 44 e 47, observamos que em ambos os casos as correntes decaem com praticamente a mesma intensidade. Portanto, nesse caso, não existe muita diferença entre a cadeia estar puramente na fase difusiva ou apenas ter Δ centrado nesta fase. Por essa análise vemos que o comportamento característico da fase difusiva prevalece sobre aquele característico da fase balística.

A Figura 48 apresenta a corrente de energia em função de N , painel (a), para

$\Delta = 0.5$ e $\Delta = 1.5$ curvas pretas e vermelhas, respectivamente. As curvas contínuas representam $f = 0.5$, enquanto que as curvas pontilhadas correspondem à inversão dos reservatórios.

Para $\Delta = 1.5$, curvas vermelhas do painel (a) da Figura 48, observamos um comportamento similar ao caso em que a cadeia tinha assimetria delimitada. A corrente de energia decai com o tamanho do sistema. Esse decaimento é diferente de acordo com o sentido de propagação da corrente, possibilitando dessa forma retificação na corrente de energia. Sua respectiva retificação, apresentada no painel (c) da Figura 48, tem uma pequena diminuição mas se mantém à medida que aumentamos o número de sítios.

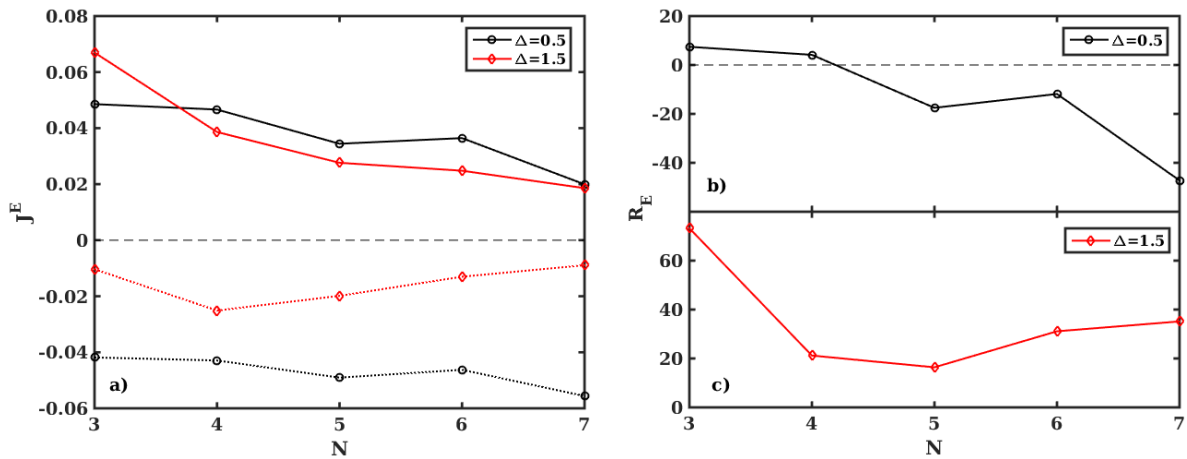


Figura 48 – Corrente de energia, painel (a), em função do tamanho da cadeia N para $\delta = 0.25$, $h = 0.1$ e $\zeta = 0.0$. Na curva preta o parâmetro de anisotropia está centrado em $\Delta = 0.5$, enquanto que na curva vermelha está centrado em $\Delta = 1.5$. A linha contínua é para $f = 0.5$ e a tracejada representa a inversão dos reservatórios. Foi usada assimetria acumulativa em $\Delta_{i,i+1}$. As retificações para $\Delta = 0.5$ e $\Delta = 1.5$ estão apresentadas nos painéis (b) e (c), respectivamente.

Já para $\Delta = 0.5$, curvas pretas da Figura 48, há um comportamento diferente do que vimos até o momento. Observe que a corrente de energia apresenta um grande decaimento com tamanho do sistema quando a corrente se propaga da esquerda para a direita, ou seja, quando $f = 0.5$. No entanto, quando invertermos os reservatórios ($f = -0.5$) e a corrente passa a se propagar da direita para a esquerda, ela aumenta a sua intensidade (módulo) à medida que aumentamos o tamanho do sistema. Note que é o mesmo sistema, a única mudança é a inversão dos reservatórios. Portanto, à medida que aumentamos a cadeia, há um favorecimento da passagem de corrente em um dado sentido, enquanto que no sentido contrário é dificultada a sua propagação. Isso faz a retificação aumentar com o tamanho da cadeia, o que observamos no painel (b) da Figura 48. Note que há uma inversão de retificação e ela cresce, em módulo, com o número de sítios.

5.4 Conclusão

Neste trabalho conectamos uma cadeia XXZ a reservatórios magnéticos e investigamos as correntes de spin e energia e suas respectivas retificações no estado estacionário de não equilíbrio (NESS). Para isso, aplicamos uma assimetria *graded* no parâmetro de anisotropia Δ e no campo magnético externo. Estávamos interessados em saber se é possível controlar e manipular as correntes via mecanismos externos. Ou seja, caso a cadeia já tivesse sido preparada com suas assimetrias intrínsecas e conectada aos reservatórios com as correntes fluindo através do sistema, se aplicássemos um campo externo conseguiríamos modificá-las? Vimos que a corrente de spin é mais robusta a essas modificações. Via campo externo é possível alterar sua intensidade, no entanto, o seu sentido de propagação depende exclusivamente da disposição dos reservatórios. Logo não conseguimos, por esse método, invertê-la. Já a corrente de energia é mais simples de ser controlada. Uma vez que há uma dependência explícita do campo externo em sua expressão, conseguimos inverter seu sentido de propagação comparado ao sentido da corrente de spin, via aplicação do campo. Observamos também a inversão nas retificações, ou seja, em uma mesma cadeia, se a corrente de spin se propaga com mais facilidade da esquerda para a direita, vemos que a corrente de energia se propaga com mais facilidade da direita para esquerda. Portanto, é possível controlar as correntes e suas retificações através de mecanismos externos.

Nesse estudo tivemos que usar um f intermediário, pois quando ele é muito pequeno as correntes são muito próximas a zero. Em contrapartida, para f muito grande, além das correntes voltarem a diminuir, fazer simulações de evolução temporal com o código que temos fica inviável. Quanto maior o valor de f , mais tempo o sistema demora a estacionar.

Temos alguns indícios do efeito das fases presentes no modelo no comportamento das correntes. Para cadeias com $N = 7$ sítios vimos que, se Δ está centrado na fase cujo regime de transporte é balístico, as correntes apresentam um pequeno decaimento, comparado com o caso em que Δ está centrado na fase cujo regime de transporte é difusivo. No entanto, há uma necessidade de aumentar o tamanho do sistema para poder confirmar esse efeito.

Vimos então que o modelo XXZ se torna um candidato a dispositivo retificador de corrente de spin e de energia. No entanto observamos que as correntes apresentam um comportamento nada trivial com os parâmetros do sistema.

Conclusão

Apresentamos aqui três trabalhos que desenvolvemos durante o doutorado, sendo dois concluídos e publicados e um ainda em andamento. A ligação entre eles é que tratamos de cadeias quânticas de spin e estamos interessados em situações de não equilíbrio. Vimos que podemos gerar esse tipo de dinâmica tanto em sistemas isolados quanto em sistemas conectados a reservatórios. No caso da cadeia isolada, estávamos interessados em uma dinâmica de “tempos curtos”, enquanto, para a cadeia com reservatórios, o nosso interesse foi no estado estacionário de não equilíbrio (NESS), alcançado somente para tempos longos. Tendo isso em mente, dividimos esta tese em duas partes, onde em uma parte estão os trabalhos envolvendo a cadeia de spin como um sistema isolado e na outra parte a cadeia de spin é um sistema quântico aberto.

Em nosso primeiro trabalho, conectamos duas cadeias XXZ em fases magnéticas distintas e observamos o efeito desse *quench* na magnetização por sítio e na entropia de emaranhamento ao longo das duas cadeias. Como uma das cadeias está na fase ferromagnética, a informação não se propaga nela, devido ao *gap* presente nessa fase. Portanto, a dinâmica se concentra na cadeia que está na fase Líquido de Luttinger (*LL*). Vimos que, ao conectar as duas cadeias, essa informação se propaga obedecendo um cone de luz. Fomos variando o parâmetro de anisotropia da cadeia da direita dentro da fase *LL* e calculamos a velocidade da borda do cone de luz para cada valor de Δ . Observamos que essas velocidades dependem somente do parâmetro do *bulk* do sistema e concordam justamente com as velocidades das excitações, spinons e estados ligados, existentes nessa fase do modelo. Para $\Delta > \Delta^*$ há o aparecimento de apenas um cone luz, enquanto que para $\Delta < \Delta^*$ surgem dois, sendo que, exatamente nessa última região de parâmetros, há previsão teórica de que existem estados ligados com velocidade máxima maior do que a dos spinons. Ao realizar o *quench* geramos excitações que se propagam no sistema; as assinaturas dessas excitações são observadas nos cones de luz da magnetização por sítio e da entropia de emaranhamento. Podemos então usar o cone de luz para identificar as excitações de maior velocidade geradas na cadeia.

Além da dinâmica, analisamos o estado assintótico comparando-o com o estado de equilíbrio, definido como o estado fundamental do sistema formado pelas duas cadeias conectadas. A borda do cone de luz, como esperado, é uma região altamente fora do equilíbrio. É onde o estado do sistema mais se distancia do estado de equilíbrio. No entanto, para a região da cadeia que está profundamente dentro do cone de luz, vemos que o estado do sistema se aproxima do estado de equilíbrio. Acreditamos que, se a cadeia for semi-infinita, no limite de tempos longos, o sistema vai para o estado de equilíbrio, como esperado para um *quench* local.

No nosso segundo trabalho, analisamos uma propriedade de blindagem que surge no modelo de Ising com campo transversal quando um sítio $i = L$ apresenta campo nulo. Mais especificamente, se o estado global da cadeia for o estado de Gibbs, temos que o estado reduzido da cadeia à esquerda de $i = L$ independe dos parâmetros da cadeia à direita de $i = L$. Logo, esse sítio com campo nulo blinda uma parte da cadeia com relação à outra. Embora essa propriedade tenha sido provada no estado de equilíbrio, realizamos um *quench* local, alterando o campo magnético transversal aplicado no primeiro sítio de uma cadeia com 60 sítios, sendo que o sítio $i = 15$ tinha campo nulo, vimos o surgimento de um cone de luz, que é refletido pelo sítio com campo nulo. Temos, portanto, uma propriedade de blindagem dinâmica. É importante ressaltar que a origem da blindagem dinâmica está na comutação entre os hamiltonianos das duas partes da cadeia, enquanto a blindagem do caso estático leva em conta também a particularidade do modelo.

Por fim, apresentamos nosso trabalho da cadeia XXZ conectada a reservatórios magnéticos nas extremidades. O nosso interesse é analisar a retificação das correntes de spin e energia nesse sistema. Mais especificamente, queríamos saber se é possível controlar e manipular essas correntes e suas respectivas retificações através de mecanismos externos. Vimos que o sentido de propagação da corrente de spin depende somente da escolha dos reservatórios, portanto ela é mais robusta e mais difícil de ser manipulada via campo magnético. No entanto, ao aplicar um campo *graded* ao longo da cadeia, é possível de modificar sua intensidade embora, não o seu sentido. Esse é justamente o ingrediente necessário para observar retificação na corrente de spin. Já a corrente de energia pode ser modificada com mais facilidade, lembrando que nela temos uma dependência explícita do campo. Portanto, podemos inverter seu sentido de propagação com relação à corrente de energia com uma escolha adequada do campo. É possível não somente inverter a corrente de energia em relação à corrente de spin, mas também inverter seu sentido com os reservatórios fixos, variando o campo. Isto é, podemos ter J^E se propagando da esquerda para a direita e então modificamos o campo de tal modo que, sem inverter os reservatórios, conseguimos fazer a corrente de energia se propagar da direita para a esquerda.

Como consequência da inversão dos sentidos das correntes, conseguimos inverter a retificação entre elas, ou seja, podemos ter a corrente de spin com retificação positiva e a corrente de energia com retificação negativa, e vice-versa. Isso significa que, enquanto a corrente de spin flui com mais facilidade em um sentido, a corrente de energia flui com maior facilidade no sentido contrário. Tudo isso é possível ao se aplicar um campo externo na cadeia.

Um outro ponto que analisamos foi o comportamento das correntes de acordo com as fases em que a cadeia está. Quando a cadeia está na fase cujo regime de transporte é balístico (de acordo com resultados recentes da literatura), as correntes pouco diminuem com o tamanho do sistema, ao passo que a retificação é muito pequena. Porém, quando

a cadeia está na fase cujo regime de transporte é difusivo, as correntes apresentam um maior decaimento com o tamanho do sistema e a retificação é maior do que no caso anterior. Quando a cadeia está centrada no ponto de transição, há uma mistura desses dois comportamentos. As correntes apresentam um pequeno decaimento com o tamanho do sistema e a retificação fica em um valor intermediário. Notamos que os nossos resultados são para cadeias pequenas e que a extensão para cadeias maiores permanece como trabalho a ser realizado.

Temos então que as correntes são extremamente sensível à escolha de parâmetros, mostrando o quão rico é este modelo e como ainda pode ser explorado. De acordo com os nossos resultados, ele é um candidato a dispositivo retificador, sendo possível controlar e inverter a corrente de energia bem como sua retificação.

Referências

- [1] Giamarchi, T: *Quantum physics in one dimension*. Clarendon; Oxford University Press, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 1, 18 e 111.
- [2] He, T: *A brief exposition on Luttinger liquid theory*. http://isites.harvard.edu/fs/docs/icb.topic1191951.files/Temple_He_Luttinger_Liquids.pdf, 2012. acessado em 03/11/2016. Citado na página 1.
- [3] Karbach, M e G Muller: *Introduction to the Bethe ansatz I*. arXiv preprint cond-mat/9809162, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 18.
- [4] Miranda, E: *Introduction to bosonization*. Brazilian Journal of Physics, 33(1):3–35, 2003. Citado na página 2.
- [5] White, S R: *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. Lett., 69(19):2863, 1992. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 115.
- [6] Schollwöck, U: *The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states*. Ann. Phys., 326(1):96–192, 2011. Citado na página 2.
- [7] White, S R e A E Feiguin: *Real-time evolution using the density matrix renormalization group*. Phys. Rev. Lett., 93(7):076401, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 21.
- [8] Feiguin, A E e S R White: *Time-step targeting methods for real-time dynamics using the density matrix renormalization group*. Phys. Rev. B, 72(2):020404, 2005. Citado na página 2.
- [9] Greiner, M, O Mandel, T W Hänsch e I Bloch: *Collapse and revival of the matter wave field of a Bose–Einstein condensate*. Nature, 419(6902):51–54, 2002. Citado na página 2.
- [10] Bloch, I: *Ultracold quantum gases in optical lattices*. Nature Physics, 1(1):23–30, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 2, 9 e 10.
- [11] Bloch, I, J Dalibard e W Zwerger: *Many-body physics with ultracold gases*. Rev. Mod. Phys., 80(3):885, 2008. Citado na página 2.
- [12] Jaksch, D e P Zoller: *The cold atom Hubbard toolbox*. Ann. Phys., 315(1):52–79, 2005. Citado na página 2.

-
- [13] Duan, L M, E Demler e MD Lukin: *Controlling spin exchange interactions of ultracold atoms in optical lattices*. Phys. Rev. Lett., 91(9):090402, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 2, 10 e 11.
- [14] Polkovnikov, A, K Sengupta, A Silva e M Vengalattore: *Colloquium: Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems*. Rev. Mod. Phys., 83(3):863, 2011. Citado na página 2.
- [15] Sommer, A, M Ku, G Roati e M W Zwierlein: *Universal spin transport in a strongly interacting Fermi gas*. Nature, 472(7342):201–204, 2011. Citado na página 2.
- [16] Rigol, M, A Muramatsu e M Olshanii: *Hard-core bosons on optical superlattices: Dynamics and relaxation in the superfluid and insulating regimes*. Phys. Rev. A, 74:053616, Nov 2006. Citado na página 2.
- [17] Cazalilla, M A: *Effect of Suddenly Turning on Interactions in the Luttinger Model*. Phys. Rev. Lett., 97:156403, Oct 2006. Citado na página 2.
- [18] Calabrese, P, F H L Essler e M Fagotti: *Quantum quench in the transverse-field Ising chain*. Phys. Rev. Lett., 106(22):227203, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 43.
- [19] Ziraldo, S e G E Santoro: *Relaxation and thermalization after a quantum quench: Why localization is important*. Phys. Rev. B, 87(6):064201, 2013. Citado na página 2.
- [20] Ziraldo, S, A Silva e G E Santoro: *Relaxation dynamics of disordered spin chains: Localization and the existence of a stationary state*. Phys. Rev. Lett., 109(24):247205, 2012. Citado na página 2.
- [21] Manmana, S R, S Wessel, R M Noack e A Muramatsu: *Strongly correlated fermions after a quantum quench*. Phys. Rev. Lett., 98(21):210405, 2007. Citado na página 2.
- [22] Ilievski, E, J De Nardis, B Wouters, J S Caux, F H L Essler e T Prosen: *Complete Generalized Gibbs Ensembles in an Interacting Theory*. Phys. Rev. Lett., 115:157201, Oct 2015. Citado na página 2.
- [23] Karrasch, C, JE Moore e F Heidrich-Meisner: *Real-time and real-space spin and energy dynamics in one-dimensional spin-1/2 systems induced by local quantum quenches at finite temperatures*. Phys. Rev. B, 89(7):075139, 2014. Citado na página 3.
- [24] Eisler, V e I Peschel: *Evolution of entanglement after a local quench*. J. Stat. Mech.: Theory Exp., 2007(06):P06005, 2007. Citado na página 3.

- [25] Langer, S, F Heidrich-Meisner, J Gemmer, IP McCulloch e U Schollwöck: *Real-time study of diffusive and ballistic transport in spin-1 2 chains using the adaptive time-dependent density matrix renormalization group method*. Phys. Rev. B, 79(21):214409, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 3, 14 e 15.
- [26] Langer, S, M Heyl, I P McCulloch e F Heidrich-Meisner: *Real-time energy dynamics in spin-1 2 Heisenberg chains*. Phys. Rev. B, 84(20):205115, 2011. Citado 3 vezes nas páginas 3, 14 e 15.
- [27] Rajak, A e U Divakaran: *Effect of double local quenches on the Loschmidt echo and entanglement entropy of a one-dimensional quantum system*. J. Stat. Mech.: Theory Exp., (4):043107, 2016. Citado 4 vezes nas páginas 3, 13, 14 e 43.
- [28] Sabetta, T e G Misguich: *Nonequilibrium steady states in the quantum XXZ spin chain*. Phys. Rev. B, 88:245114, Dec 2013. Citado na página 3.
- [29] Bhaseen, M J, B Doyon, A Lucas e K Schalm: *Energy flow in quantum critical systems far from equilibrium*. Nat. Phys., 11(6):509–514, junho 2015. Citado na página 3.
- [30] Biella, A, A De Luca, J Viti, D Rossini, L Mazza e R Fazio: *Energy transport between two integrable spin chains*. Phys. Rev. B, 93:205121, May 2016. Citado na página 3.
- [31] Bertini, B, M Collura, J De Nardis e M Fagotti: *Transport in out-of-equilibrium XXZ chains: exact profiles of charges and currents*. ArXiv e-prints, 2016. Citado na página 3.
- [32] Collura, M e D Karevski: *Quantum quench from a thermal tensor state: boundary effects and generalized Gibbs ensemble*. Phys. Rev. B, 89(21):214308, 2014. Citado na página 3.
- [33] De Luca, A, J Viti, L Mazza e D Rossini: *Energy transport in Heisenberg chains beyond the Luttinger liquid paradigm*. Phys. Rev B, 90(16):161101, 2014. Citado na página 3.
- [34] Lieb, E H. e D W. Robinson: *The finite group velocity of quantum spin systems*. Communications in Mathematical Physics, 28(3):251–257, 1972. Citado na página 3.
- [35] Manmana, S R, S Wessel, R M Noack e A Muramatsu: *Time evolution of correlations in strongly interacting fermions after a quantum quench*. Phys. Rev. B, 79(15):155104, 2009. Citado na página 3.
- [36] Bertini, B e M Fagotti: *Determination of the non-equilibrium steady state emerging from a defect*. arXiv preprint arXiv:1604.04276, 2016. Citado na página 3.

- [37] Läuchli, A M e C Kollath: *Spreading of correlations and entanglement after a quench in the one-dimensional Bose–Hubbard model*. J. Stat. Mech.: Theory Exp., 2008(05):P05018, 2008. Citado na página 3.
- [38] Carleo, G, F Becca, L Sanchez-Palencia, S Sorella e M Fabrizio: *Light-cone effect and supersonic correlations in one-and two-dimensional bosonic superfluids*. Phys. Rev. A, 89(3):031602, 2014. Citado na página 3.
- [39] Zamora, A, J Rodríguez-Laguna, M Lewenstein e L Tagliacozzo: *Splitting a critical spin chain*. J. Stat. Mech.: Theory Exp., 2014(9):P09035, 2014. Citado na página 3.
- [40] Gobert, D, C Kollath, U Schollwöck e G Schütz: *Real-time dynamics in spin-1 2 chains with adaptive time-dependent density matrix renormalization group*. Phys. Rev. E, 71(3):036102, 2005. Citado na página 3.
- [41] Collura, M, P Calabrese e F HL Essler: *Quantum quench within the gapless phase of the spin- 1 2 Heisenberg XXZ spin chain*. Phys. Rev. B, 92(12):125131, 2015. Citado na página 3.
- [42] Alba, V e F Heidrich-Meisner: *Entanglement spreading after a geometric quench in quantum spin chains*. Phys. Rev. B, 90(7):075144, 2014. Citado na página 3.
- [43] Vlijm, R, M Ganahl, D Fioretto, M Brockmann, M Haque, H Gerd Evertz e J S Caux: *Quasi-soliton scattering in quantum spin chains*. Phys. Rev. B, 92(21):214427, 2015. Citado na página 3.
- [44] Jesenko, S e M Žnidarič: *Finite-temperature magnetization transport of the one-dimensional anisotropic Heisenberg model*. Phys. Rev. B, 84(17):174438, 2011. Citado na página 3.
- [45] Cheneau, M, P Barmettler, D Poletti, M Endres, P Schauß, T Fukuhara, C Gross, I Bloch, C Kollath e S Kuhr: *Light-cone-like spreading of correlations in a quantum many-body system*. Nature, 481(7382):484–487, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 16.
- [46] Jurcevic, P, B P Lanyon, P Hauke, C Hempel, P Zoller, R Blatt e C F Roos: *Quasiparticle engineering and entanglement propagation in a quantum many-body system*. Nature, 511(7508):202–205, 2014. Citado na página 3.
- [47] Ganahl, M, E Rabel, F HL Essler e H G Evertz: *Observation of Complex Bound States in the Spin-1/2 Heisenberg XXZ Chain Using Local Quantum Quenches*. Phys. Rev. Lett., 108(7):077206, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 3, 21 e 36.
- [48] Pižorn, I: *One-dimensional Bose-Hubbard model far from equilibrium*. Physical Review A, 88(4):043635, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 3, 56 e 59.

- [49] Prosen, T e M Žnidarič: *Long-range order in nonequilibrium interacting quantum spin chains*. Physical review letters, 105(6):060603, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 4.
- [50] Prosen, T e M Žnidarič: *Matrix product simulations of non-equilibrium steady states of quantum spin chains*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2009(02):P02035, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 4.
- [51] Breuer, H P e F Petruccione: *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press on Demand, 2002. Citado 4 vezes nas páginas 3, 53, 54 e 55.
- [52] Bonnes, L, D Charrier e A M Läuchli: *Dynamical and steady-state properties of a Bose-Hubbard chain with bond dissipation: A study based on matrix product operators*. Physical Review A, 90(3):033612, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 59.
- [53] Mendoza-Arenas, JJ, S Al-Assam, SR Clark e D Jaksch: *Heat transport in the XXZ spin chain: from ballistic to diffusive regimes and dephasing enhancement*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2013(07):P07007, 2013. Citado 6 vezes nas páginas 4, 60, 65, 71, 74 e 86.
- [54] Prosen, T: *Open XXZ Spin Chain: Nonequilibrium Steady State and a Strict Bound on Ballistic Transport*. Physical review letters, 106(21):217206, 2011. Citado 4 vezes nas páginas 4, 56, 57 e 64.
- [55] Prosen, T: *Exact Nonequilibrium Steady State of a Strongly Driven Open XXZ Chain*. Physical review letters, 107(13):137201, 2011. Citado 6 vezes nas páginas 4, 59, 64, 74, 86 e 87.
- [56] Žnidarič, M, A Scardicchio e V K Varma: *Diffusive and subdiffusive spin transport in the ergodic phase of a many-body localizable system*. Phys. Rev. Lett., 117(4):040601, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 57.
- [57] Mendoza-Arenas, J J, M Znidaric, V K Varma, J Goold, S R Clark e A Scardicchio: *Asymmetry in energy versus spin transport in certain interacting, disordered systems*. arXiv preprint arXiv:1803.11555, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 57.
- [58] Lenarčič, Z e T Prosen: *Exact asymptotics of the current in boundary-driven dissipative quantum chains in large external fields*. Physical Review E, 91(3):030103, 2015. Citado na página 4.
- [59] Schuab, L, E Pereira e G T Landi: *Energy rectification in quantum graded spin chains: Analysis of the XXZ model*. Physical Review E, 94(4):042122, 2016. Citado 6 vezes nas páginas 4, 5, 68, 69, 70 e 76.

- [60] Landi, G T, E Novais, M J de Oliveira e D Karevski: *Flux rectification in the quantum XXZ chain*. Phys. Rev. E, 90:042142, Oct 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.042142>. Citado 9 vezes nas páginas 4, 5, 67, 68, 69, 70, 75, 76 e 123.
- [61] Paula Jr, AL de, H Bragança, RG Pereira, RC Drumond e M C O Aguiar: *Spinon and bound-state excitation light cones in Heisenberg XXZ chains*. Physical Review B, 95(4):045125, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 21.
- [62] Móller, N S, A L de Paula Jr e R C Drumond: *Shielding property for thermal equilibrium states in the quantum Ising model*. Physical Review E, 97(3):032101, 2018. Citado 3 vezes nas páginas 5, 43 e 44.
- [63] Paula Jr, A L de, E Pereira, R C Drumond e M C O Aguiar: *Energy current manipulation and reversal of rectification in graded XXZ spin chains*. arXiv preprint arXiv:1808.07362, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 67.
- [64] Trotzky, S, P Cheinet, S Fölling, M Feld, U Schnorrberger, A M Rey, A Polkovnikov, E A Demler, M D Lukin e I Bloch: *Time-resolved observation and control of superexchange interactions with ultracold atoms in optical lattices*. Science, 319(5861):295–299, 2008. Citado na página 11.
- [65] Feiguin, Adrian: *The time-dependent DMRG and its applications*, 2015. http://www.iip.ufrn.br/media/pdf/dmrg_AdrianFeiguin_06_2015.pdf, acesso em 2018-10-17 . Citado 3 vezes nas páginas 12, 13 e 119.
- [66] Calabrese, P e J Cardy: *Evolution of entanglement entropy in one-dimensional systems*. J. Stat. Mech.: Theory Exp., (04):P04010, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 43.
- [67] Calabrese, P e J Cardy: *Entanglement and correlation functions following a local quench: a conformal field theory approach*. J. Stat. Mech.: Theory Exp., (10):P10004, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 43.
- [68] Nachtergaele, Bruno, Yoshiko Ogata e Robert Sims: *Propagation of correlations in quantum lattice systems*. Journal of statistical physics, 124(1):1–13, 2006. Citado na página 15.
- [69] Motoyama, N, H Eisaki e S Uchida: *Magnetic Susceptibility of Ideal Spin 1 / 2 Heisenberg Antiferromagnetic Chain Systems, Sr₂CuO₃ and SrCuO₂*. Phys. Rev. Lett., 76:3212–3215, Apr 1996. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.76.3212>. Citado na página 17.
- [70] Takahashi, M: *Thermodynamics of one-dimensional solvable models*. Cambridge University Press, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 17, 19 e 21.

- [71] Karabach, M, G Müller, H Gould e J Tobochnik: *Introduction to the Bethe ansatz I*. Computers in Physics, 11(1):36–43, 1997. Citado na página 18.
- [72] Karbach, Michael, Kun Hu e Gerhard Müller: *Introduction to the Bethe ansatz III*. ArXiv e-prints, 2000. Citado na página 18.
- [73] Senechal, D: *An introduction to bosonization*. Em *Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons*, páginas 139–186. Springer, 2004. Citado na página 19.
- [74] Pereira, R G, S R White e I Affleck: *Exact edge singularities and dynamical correlations in spin-1/2 chains*. Phys. Rev. Lett., 100(2):027206, 2008. Citado na página 19.
- [75] Koma, T e B Nachtergaele: *The spectral gap of the ferromagnetic XXZ-chain*. Lett. Math. Phys., 40(1):1–16, 1997. Citado na página 20.
- [76] Collura, M e P Calabrese: *Entanglement evolution across defects in critical anisotropic Heisenberg chains*. J. Phys. A: Math. Theor., 46(17):175001, 2013. Citado na página 22.
- [77] Divakaran, U, F Iglói e H Rieger: *Non-equilibrium quantum dynamics after local quenches*. J. Stat. Mech.: Theory Exp., (10):P10027, 2011. Citado na página 22.
- [78] Iglói, F, Z Szatmári e Y C Lin: *Entanglement entropy dynamics of disordered quantum spin chains*. Phys. Rev. B, 85(9):094417, 2012. Citado na página 22.
- [79] Iglói, F, Z Szatmári e Y C Lin: *Entanglement entropy with localized and extended interface defects*. Phys. Rev. B, 80(2):024405, 2009. Citado na página 22.
- [80] Nielsen, M A e I Chuang: *Quantum computation and quantum information*, 2002. Citado na página 23.
- [81] Calabrese, P e J Cardy: *Entanglement entropy and quantum field theory*. J. Stat. Mech.: Theory Exp., (06):P06002, 2004. Citado na página 30.
- [82] Laflorencie, N, E S Sørensen, M S Chang e I Affleck: *Boundary effects in the critical scaling of entanglement entropy in 1D systems*. Phys. Rev. Lett., 96(10):100603, 2006. Citado na página 30.
- [83] Drumond, R C e N S Móller: *Bounding entanglement spreading after a local quench*. Physical Review A, 95(6):062301, 2017. Citado na página 31.
- [84] Kim, H e D A Huse: *Ballistic spreading of entanglement in a diffusive nonintegrable system*. Phys. Rev. Lett., 111(12):127205, 2013. Citado na página 32.

- [85] Eliëns, I S, F B Ramos, J C Xavier e R G Pereira: *Boundary versus bulk behavior of time-dependent correlation functions in one-dimensional quantum systems*. Phys. Rev. B, 93:195129, May 2016. Citado na página 40.
- [86] Abraham, DB, E Barouch, G Gallavotti e A Martin-Löf: *Thermalization of a magnetic impurity in the isotropic XY model*. Phys. Rev. Lett., 25(20):1449–1450, 1970. Citado na página 40.
- [87] Yoshizawa, H, K Hirakawa, SK Satija e G Shirane: *Dynamical correlation functions in a one-dimensional Ising-like antiferromagnetic CsCo Cl₃: A neutron scattering study*. Physical Review B, 23(5):2298, 1981. Citado na página 43.
- [88] Móller, N S: *Local Quenches on Quantum Many Body Systems*. Tese de Doutorado, Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, 2018. Citado na página 44.
- [89] Fendley, Paul: *Modern Statistical Mechanics*. <http://galileo.phys.virginia.edu/~pf7a/book.html>. Citado na página 45.
- [90] Scully, M O e M S Zubairy: *Quantum optics*, 1999. Citado na página 53.
- [91] Carmichael, H J: *Statistical Methods in Quantum Optics 1: Master Equations and Fokker-Planck Equations (Theoretical and Mathematical Physics)*, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 54 e 55.
- [92] Toledo Piza, A F R de: *Sistemas quânticos compostos e emaranhamento, sistemas quânticos abertos e decoerência*. II Escola de Física Teórica do Departamento de Física Matemática, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 124.
- [93] Popkov, V, Dragi Karevski e Gunter M Schütz: *Driven isotropic Heisenberg spin chain with arbitrary boundary twisting angle: exact results*. Physical Review E, 88(6):062118, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 56, 57 e 59.
- [94] Prosen, T: *Matrix product solutions of boundary driven quantum chains*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 48(37):373001, 2015. Citado na página 56.
- [95] Schwager, H, J I Cirac e G Giedke: *Dissipative spin chains: Implementation with cold atoms and steady-state properties*. Phys. Rev. A, 87(2):022110, 2013. Citado na página 57.
- [96] Ramos, T, H Pichler, A J Daley e P Zoller: *Quantum spin dimers from chiral dissipation in cold-atom chains*. Phys. Rev. Lett., 113(23):237203, 2014. Citado na página 57.

- [97] Krinner, S, M Lebrat, D Husmann, C Grenier, J P B e T Esslinger: *Mapping out spin and particle conductances in a quantum point contact*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 113(29):8144–8149, 2016. Citado na página 57.
- [98] Krinner, S, T Esslinger e J P Brantut: *Two-terminal transport measurements with cold atoms*. Journal of Physics: Condensed Matter, 29(34):343003, 2017. Citado na página 57.
- [99] Buča, B e T Prosen: *Exactly solvable counting statistics in open weakly coupled interacting spin systems*. Phys. Rev. Lett., 112(6):067201, 2014. Citado na página 57.
- [100] Žnidarič, M: *Spin transport in a one-dimensional anisotropic Heisenberg model*. Phys. Rev. Lett., 106(22):220601, 2011. Citado na página 57.
- [101] Medvedyeva, M V, T Prosen e M Žnidarič: *Influence of dephasing on many-body localization*. Physical Review B, 93(9):094205, 2016. Citado na página 59.
- [102] Prosen, T: *Exact nonequilibrium steady state of an open Hubbard chain*. Physical review letters, 112(3):030603, 2014. Citado na página 59.
- [103] Pereira, E: *Heat, work, and energy currents in the boundary-driven XXZ spin chain*. Phys. Rev. E, 97(2):022115, 2018. Citado na página 61.
- [104] Prosen, T: *Comments on a boundary-driven open XXZ chain: asymmetric driving and uniqueness of steady states*. Physica Scripta, 86(5):058511, 2012. Citado na página 63.
- [105] Evans, D E: *Irreducible quantum dynamical semigroups*. Communications in Mathematical Physics, 54(3):293–297, 1977. Citado na página 63.
- [106] Schollwöck, U: *The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states*. Annals of Physics, 326(1):96–192, 2011. Citado na página 63.
- [107] Verstraete, F, V Murg e J I Cirac: *Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems*. Advances in Physics, 57(2):143–224, 2008. Citado na página 63.
- [108] Prosen, T e B Buča: *Integrable non-equilibrium steady state density operators for boundary driven XXZ spin chains: observables and full counting statistics*. arXiv preprint arXiv:1501.06156, 2015. Citado na página 64.
- [109] Li, N, J Ren, L Wang, G Zhang, Peter Hänggi e B Li: *Colloquium: Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond*. Reviews of Modern Physics, 84(3):1045, 2012. Citado na página 67.

- [110] Dhar, A: *Heat transport in low-dimensional systems*. Advances in Physics, 57(5):457–537, 2008. Citado na página 67.
- [111] Lepri, S, R Livi e A Politi: *Thermal conduction in classical low-dimensional lattices*. Physics reports, 377(1):1–80, 2003. Citado na página 67.
- [112] Wang, J, E Pereira e G Casati: *Thermal rectification in graded materials*. Phys. Rev. E, 86:010101, Jul 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.86.010101>. Citado na página 67.
- [113] Pereira, E: *Graded anharmonic crystals as genuine thermal diodes: Analytical description of rectification and negative differential thermal resistance*. Phys. Rev. E, 82:040101, Oct 2010. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.82.040101>. Citado na página 67.
- [114] Chen, S, E Pereira e G Casati: *Ingredients for an efficient thermal diode*. EPL (Europhysics Letters), 111(3):30004, 2015. Citado na página 67.
- [115] Pereira, E, H CF Lemos e R R Ávila: *Ingredients of thermal rectification: The case of classical and quantum self-consistent harmonic chains of oscillators*. Physical Review E, 84(6):061135, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 68 e 71.
- [116] Pereira, E: *Sufficient conditions for thermal rectification in general graded materials*. Physical Review E, 83(3):031106, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 68 e 71.
- [117] Balachandran, V, G Benenti, E Pereira, G Casati e D Poletti: *Perfect Diode in Quantum Spin Chains*. Phys. Rev. Lett., 120:200603, May 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.120.200603>. Citado na página 70.
- [118] Pereira, E: *Rectification and one-way street for the energy current in boundary-driven asymmetric quantum spin chains*. Phys. Rev. E, 95:030104, Mar 2017. Citado 2 vezes nas páginas 71 e 76.
- [119] Hoogdalem, K A van e D Loss: *Rectification of spin currents in spin chains*. Physical Review B, 84(2):024402, 2011. Citado na página 71.
- [120] Benenti, G, G Casati, T Prosen e D Rossini: *Negative differential conductivity in far-from-equilibrium quantum spin chains*. EPL (Europhysics Letters), 85(3):37001, 2009. Citado na página 74.
- [121] Popkov, V: *Alternation of sign of magnetization current in driven XXZ chains with twisted XY boundary gradients*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2012(12):P12015, 2012. Citado na página 81.

-
- [122] Feiguin, A E, A Avella e F Mancini: *The Density Matrix Renormalization Group and its time-dependent variants*. Em *AIP Conference Proceedings-American Institute of Physics*, volume 1419, página 5, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 115 e 120.
- [123] Malvezzi, A L: *An introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems*. *Brazilian Journal of Physics*, 33(1):55–72, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 115 e 116.
- [124] De Chiara, G, M Rizzi, D Rossini e S Montangero: *Density matrix renormalization group for dummies*. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 5(7):1277–1288, 2008. Citado na página 115.
- [125] Lucas Lage, S: *Retificação de Energia e Magnetização em Cadeias Quânticas de Spin: Análise do Modelo XXZ*. Tese de Mestrado, Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, 2018. Citado na página 123.

Apêndices

APÊNDICE A – Resultados para o modelo XXZ

Na seção 1.4 foi apresentada uma visão mais geral do modelo XXZ e apresentados alguns tipos de excitações que apareceram no nosso primeiro trabalho. Neste apêndice vamos entrar em mais detalhes a respeito das transformadas de Jordan-Wigner aplicadas ao modelo XXZ; em seguida mostraremos como foi obtido Δ^* , que esse é o valor de Δ no qual os estados ligados passam a ter velocidades maiores do que os spinons.

A.1 Transformada de Jordan-Wigner

Vamos aqui utilizar as transformadas de Jordan-Wigner para mapear o modelo XXZ de spin-1/2 em um sistema de férmions sem spin. Para isso vamos partir do hamiltoniano XXZ escrito em termos dos operadores S^\pm

$$H = J \sum_{i=1}^{N-1} \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z \right]. \quad (\text{A.1})$$

Usando as transformações de Jordan-Wigner [1]

$$\begin{aligned} S_j^z &\rightarrow c_j^\dagger c_j - 1/2, \\ S_j^+ &\rightarrow c_j^\dagger e^{i\pi\phi_j}, \\ S_j^- &\rightarrow c_j e^{-i\pi\phi_j}, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

onde $\phi_j \equiv \sum_{l=1}^{j-1} c_l^\dagger c_l$, sendo c_j operadores locais fermiônicos, que satisfazem a relação de anticomutação $\{c_l, c_m^\dagger\} = \delta_{l,m}$, o primeiro termo da equação A.1 fica

$$\begin{aligned} S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+ &= - \left(c_j^\dagger e^{i\pi\phi_j} e^{-i\pi\phi_{j+1}} c_{j+1} + c_j e^{-i\pi\phi_j} e^{i\pi\phi_{j+1}} c_{j+1}^\dagger \right) \\ &= - \left(c_j^\dagger e^{-i\pi c_j^\dagger c_j} c_{j+1} + c_j e^{i\pi c_j^\dagger c_j} c_{j+1}^\dagger \right) = - \left(c_j^\dagger c_{j+1} - c_j c_{j+1}^\dagger \right), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

onde usamos $c_j e^{i\pi c_j^\dagger c_j} = -c_j$ e $c_j^\dagger e^{i\pi c_j^\dagger c_j} = c_j^\dagger$. Substituindo esse resultado na equação A.1 chegamos ao hamiltoniano de férmions sem spins

$$H = \sum_i \left[-T(c_i^\dagger c_{i+1} + h.c) + U \left(c_i^\dagger c_i - \frac{1}{2} \right) \left(c_{i+1}^\dagger c_{i+1} - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (\text{A.4})$$

que é dividido em dois termos: o primeiro é o termo cinético; e o segundo é o termo de interação entre primeiros vizinhos, como discutido no corpo da tese.

A.2 Obtenção de Δ^*

Ao apresentar as excitações do modelo XXZ na fase Líquido de Luttinger (LL), discutimos que para $\Delta < 0$, além dos spinons, existe outro tipo de excitação, conhecida como estado ligado. Mencionamos que existe um certo Δ^* a partir do qual os estados ligados mais rápidos têm velocidade maior do que os spinons. Vamos aqui obter o valor de Δ^* , para isso teremos que partir da equação de dispersão dos estados ligados

$$E_n(k) = \frac{\pi\sqrt{1-\Delta^2}}{\arccos \Delta} \left| \sin\left(\frac{k}{2}\right) \right| \sqrt{1 + \cot^2 \left[\frac{n\pi}{2} \left(\frac{\pi}{\arccos \Delta} - 1 \right) \right] \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)}. \quad (\text{A.5})$$

Pela relação de dispersão, equação A.5, podemos obter a velocidade dos estados ligados

$$\begin{aligned} v_b &= \frac{dE_n}{dk}, \\ &= \frac{\pi\sqrt{1-\Delta^2}}{2 \arccos \Delta} \cos\left(\frac{k}{2}\right) \left(\sqrt{1 + \cot^2 \left[\frac{n\pi}{2} \left(\frac{\pi}{\arccos \Delta} - 1 \right) \right] \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\cot^2 \left[\frac{n\pi}{2} \left(\frac{\pi}{\arccos \Delta} - 1 \right) \right] \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)}{\sqrt{1 + \cot^2 \left[\frac{n\pi}{2} \left(\frac{\pi}{\arccos \Delta} - 1 \right) \right] \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)}} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Observe que o primeiro termo que aparece é a velocidade dos spinons, dada pela equação 1.11. Usando essa relação e simplificando a equação A.6, temos que a velocidade dos estados ligados v_b pode ser escrita como

$$v_b = v_s \cos\left(\frac{k}{2}\right) \frac{1 + 2 \cot^2 \left[\frac{n\pi}{2} \left(\frac{\pi}{\arccos \Delta} - 1 \right) \right] \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)}{\sqrt{1 + \cot^2 \left[\frac{n\pi}{2} \left(\frac{\pi}{\arccos \Delta} - 1 \right) \right] \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)}}. \quad (\text{A.7})$$

O termo entre parênteses dentro do argumento da cotangente é aproximadamente $1/n_{m\acute{a}x}$, portanto este termo fica da forma

$$\cot^2 \left[\frac{n\pi}{2} \left(\frac{\pi}{\arccos \Delta} - 1 \right) \right] = \cot^2 \left[\frac{n\pi}{2n_{m\acute{a}x}} \right]. \quad (\text{A.8})$$

Observe que, à medida que n se aproxima de $n_{m\acute{a}x}$, a cotangente se aproxima de zero, portanto o estado ligado de maior velocidade é o de $n = 1$. Vamos então nos concentrar nesse caso.

Para $|\Delta|$ pequeno, a velocidade do estado ligado de $n = 1$ é uma função côncava de k , portanto ela tem um máximo em $k = 0$. No entanto, para $\Delta \rightarrow -1$ a velocidade em $k = 0$ se torna um mínimo local. A Figura 49 mostra esses dois extremos: a curva contínua é a velocidade em função de k para $\Delta = -0.01$, enquanto que na curva tracejada temos $\Delta = -0.9$; nesse gráfico normalizamos pela velocidade máxima dos spinons, ou

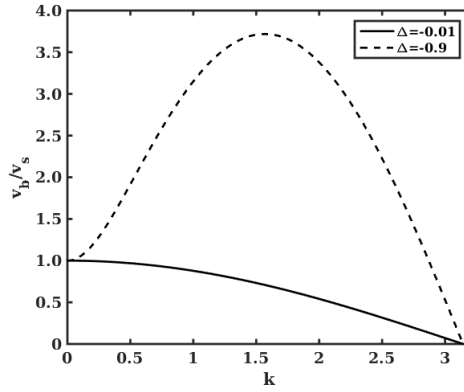


Figura 49 – Velocidade dos estados ligados com $n = 1$ em função de k para $\Delta = -0.01$, curva contínua, e para $\Delta = -0.9$, curva tracejada; normalizamos v_b por v_s .

seja, fizemos v_b/v_s . Observe que no primeiro caso o ponto $k = 0$ é um ponto de máximo, enquanto que no segundo caso é um mínimo local.

Portanto deve existir um valor Δ^* no qual a velocidade em $k = 0$ sofre essa transição. Antes desse ponto $dv_b/dt < 0$ e depois dele $dv_b/dt > 0$, logo esse ponto é um ponto de inflexão e podemos encontrá-lo exigindo a condição

$$\left. \frac{d^2 v_b}{dk^2} \right|_{k=0, \Delta=\Delta^*} = \left. \frac{d^3 E_1}{dk^3} \right|_{k=0, \Delta=\Delta^*} = 0. \quad (\text{A.9})$$

Fazendo essas derivadas e aplicando $k = 0$, a condição anterior fica da forma

$$\frac{1}{4} v_s \left(-1 + 3 \cot^2 \left[\frac{\pi}{2} \left(\frac{\pi}{\arccos \Delta^*} - 1 \right) \right] \right) = 0, \quad (\text{A.10})$$

resolvendo a equação temos que

$$\Delta^* = \cos \left(\frac{3\pi}{5} \right) = \frac{1 - \sqrt{5}}{4} \approx -0.309. \quad (\text{A.11})$$

APÊNDICE B – Introdução ao DMRG e t-DMRG

Neste apêndice daremos uma breve introdução à técnica numérica *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG) e sua extensão t-DMRG, que descreve evolução temporal. Essa técnica foi utilizada nos dois primeiros artigos de Doutorado. Aqui apresentaremos seus elementos básicos. Existe uma grande quantidade de artigos de revisão sobre essa técnica; usaremos como base, em particular, as referências [122–124].

O espaço de Hilbert para sistemas em uma dimensão cresce exponencialmente com o tamanho da cadeia, isto é, $\dim\{H\} = d^N$, onde d é dimensão local do sítio e N é o número de sítios. Isso significa que, para uma cadeia de spin-1/2 com 100 sítios, há 2^{100} estados formando uma base. Para obtê-los temos que diagonalizar uma matriz de dimensão $2^{100} \times 2^{100}$, o que se torna uma tarefa impraticável.

A técnica DMRG, desenvolvida por Steven White em 1992 [5], consegue obter o estado fundamental de sistemas de muitos corpos com interação entre primeiros vizinhos em uma dimensão. Ela é baseada na truncagem do espaço de Hilbert, sendo que somente uma pequena quantidade de estados desse espaço é suficiente para descrever o estado fundamental, como será descrito.

B.1 DMRG: parte infinita

A estrutura do DMRG é dividida em blocos e sítios livres. Começamos uma cadeia com um sítio e escrevemos seu hamiltoniano; esse sítio fará parte de uma estrutura chamada bloco. Em seguida adicionamos outro sítio e novamente escrevemos o hamiltoniano do sistema. Agora esse novo sítio é incorporado ao bloco. E assim vamos repetindo esse processo, crescendo o bloco à medida que crescemos a cadeia, como mostra a Figura 50.

A Figura 50 representa uma estrutura do DMRG: o retângulo azul é o que chamamos de bloco e a cada passo seu tamanho, isto é o número de spins contido nele, aumenta. Note que sempre temos a estrutura bloco e sítio livre, sendo que este último é livre no sentido que não faz parte dos sítios do bloco. O hamiltoniano dessa estrutura é da forma

$$H = H_B \otimes \mathbb{1}_s + \mathbb{1}_B \otimes H_s + H_B \otimes H_s, \quad (\text{B.1})$$

onde $\mathbb{1}_s$ é a matriz identidade do sítio livre com dimensão d e $\mathbb{1}_B$ é a matriz identidade do bloco com dimensão m , H_B e H_s são os hamiltonianos do bloco e do sítio livre,

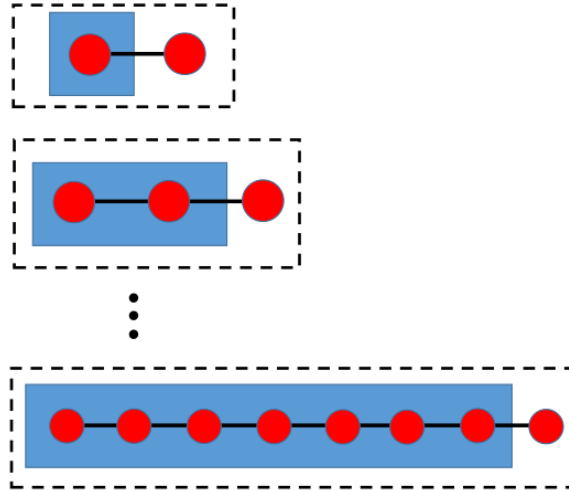


Figura 50 – Estrutura bloco, retângulo azul, e sítio livre do DMRG. A cada passo acrescentamos um sítio ao bloco.

respectivamente. Esse processo de crescimento da cadeia é iterativo: a cada passo adicionamos um sítio à cadeia; ao final de cada passo o sítio é englobado pelo bloco e H passa a ser H_B para o próximo passo. Esse é o processo de crescimento da cadeia.

Apesar da dimensão do sítio livre ser fixa, ao crescermos o sistema a dimensão do bloco vai aumentando e, se quisermos obter a solução exata para esse sistema, temos que diagonalizar H . Isso não ajuda em nada a solucionar o problema da dimensão do espaço de Hilbert. A ideia do DMRG é truncar o espaço de Hilbert do bloco com um dado número de estados m e continuar crescendo o sistema sem crescer a dimensão do bloco. Essa truncagem é feita da seguinte forma: primeiro crescemos o sistema até o bloco ter dimensão m , nesse ponto escrevemos o hamiltoniano do bloco mais o sítio, que será chamado de H_E (*enlarged block Hamiltonian*); em seguida duplicamos o tamanho do sistema com a mesma estrutura de bloco mais sítio livre, sendo $H_{E'}$ o hamiltoniano da segunda estrutura, e conectamos ao primeiro sistema como se fossem duas cadeias espelhadas, conforme ilustrado na Figura 51.

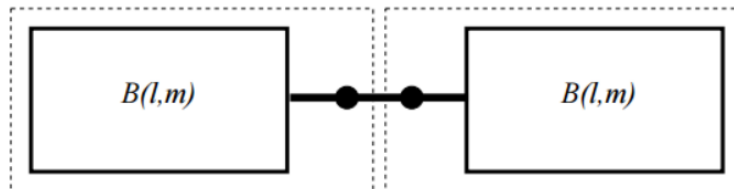


Figura 51 – Representação do superbloco com estrutura bloco–sítio livre–sítio livre–bloco. Os blocos tem dimensão m e l sítios. Figura retirada da referência [123].

Se o sistema for homogêneo, ou seja, a metade da esquerda da cadeia for igual à metade da direita, temos que $H_E = H_{E'}$. Caso a cadeia não seja homogênea, $H_{E'}$ tem que ser construído da mesma forma que H_E . Agora a estrutura passa a ser bloco–sítio

livre-sítio livre-bloco. Essa nova estrutura é chamada de superbloco e seu hamiltoniano é dado por

$$H_{SB} = H_E \otimes \mathbb{1}_{E'} + \mathbb{1}_E \otimes H_{E'} + H_E \otimes H_{E'}, \quad (\text{B.2})$$

onde $\mathbb{1}_E$ e $\mathbb{1}_{E'}$ são as matrizes identidade pertencentes ao espaço de Hilbert da metade da esquerda e da direita da cadeia, respectivamente.

A dimensão do hamiltoniano do superbloco é $\dim\{H_{SB}\} = m^2 \times d^2$. O próximo passo é diagonalizar H_{SB} exatamente e obter o estado fundamental.

$$|\Psi\rangle_G = \sum_{ij} \alpha_{ij} |E\rangle |E'\rangle, \quad (\text{B.3})$$

onde $|E\rangle$ e $|E'\rangle$ são os vetores da base dos blocos aumentados da esquerda e da direita, respectivamente. Obtido o estado fundamental, tomamos o traço parcial sobre os graus de liberdade de $H_{E'}$ e assim obtemos a matriz densidade reduzida de H_E , dada por

$$\rho_E = \sum_i^{m \times d} w_i |u_i\rangle \langle u_i|. \quad (\text{B.4})$$

Note que $\dim\{\rho_E\} = m \times d$, ou seja, existem $m \times d$ vetores $|u_i\rangle$ que formam a base de ρ_E . A ideia agora é escolher os m estados $|u_i\rangle$ com maior peso w_i para formarem os novos vetores da base; é nesse ponto que é feita a truncagem. Com essa nova base, escrevemos uma matriz W cujas colunas são os m vetores $|u_i\rangle$ e reescrevemos todos os operadores nessa nova base, como exemplificado para H_E abaixo

$$\tilde{H}_E = W^\dagger H_E W. \quad (\text{B.5})$$

Como W é uma matriz de dimensão $(m \times d) \times m$ e H_E tem dimensão $(m \times d) \times (m \times d)$, temos que \tilde{H}_E terá dimensão $m \times m$. Esse último passo é conhecido como renormalização. Ao final desse procedimento temos H_E com a mesma dimensão do bloco, porém com um sítio a mais. Portanto, H_E passa a ser o novo bloco e todo o processo é repetido. Note que ao final de cada ciclo aumentamos o tamanho do sistema de um sítio, mas mantemos fixa a dimensão do espaço de Hilbert.

Nesse processo de truncagem descartamos alguns estados; conseqüentemente existe um erro associado a essa truncagem, dado por

$$\epsilon = 1 - \sum_i^m w_i, \quad (\text{B.6})$$

sendo que a soma é realizada sobre os m w_i de maior valor. Esse erro é calculado e, caso ele seja elevado, basta aumentar o número de estado retidos m para obtermos uma precisão melhor.

Todo esse procedimento pode ser reduzido nos seguintes passos:

1. Cresça o bloco até a dimensão de truncagem desejada m ;
2. Duplique a cadeia: bloco–sítio–sítio–bloco;
3. Diagonalize H_{SB} (dimensão $m^2 \times d^2$);
4. Obtenha o estado fundamental de H_{SB} ;
5. Calcule a matriz densidade reduzida referente a H_E ;
6. Escolha os m vetores $|u_i\rangle$ com maior peso w_i para formar a nova base;
7. Reescreva todos os operadores na nova base;
8. Agora \tilde{H}_E passa a ser o novo bloco;
9. Volte ao passo n° 2.

Esse processo é conhecido como parte infinita do DMRG, pois podemos aumentar indefinidamente o tamanho do sistema. Porém, para um número fixo de estados retidos m , o erro vai aumentando à medida que crescemos o tamanho do sistema, uma vez que aumenta a quantidade de estados descartados. Portanto, precisamos reter mais estados. Uma alternativa que otimiza o código é manter fixo o erro e deixar variar o número de estados retidos.

B.2 DMRG: parte finita

Passamos agora para a parte finita do DMRG, em que a principal diferença em relação ao procedimento anterior é que o tamanho da cadeia L é mantido fixo. A ideia é crescer o sistema até atingir o número de sítios L desejados. Nesse ponto cada bloco terá $L/2 - 1$ sítios e dimensão m , como apresentado na Figura 52.

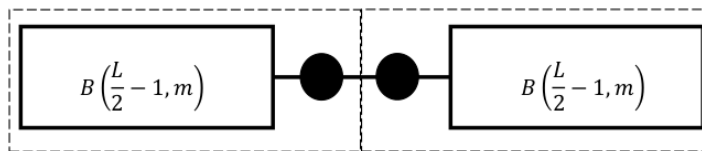


Figura 52 – Configuração da cadeia, com L sítios, para o início dos *sweeps*. Os blocos tem dimensão m e $L/2 - 1$ sítios.

O procedimento é similar ao realizado na parte infinita; no entanto, quando um bloco cresce o outro diminui, de modo a manter o tamanho da cadeia constante. Inicialmente o bloco da esquerda começa a crescer até atingir a borda, em seguida o bloco da direita começa a crescer até atingir a outra borda. Um ciclo completo é conhecido como um *sweep*. A renormalização é feita sempre no bloco que está aumentando de tamanho.

Durante a parte infinita obtemos os operadores e as matrizes W para os blocos de todos os tamanhos; devemos guardar na memória essas matrizes e usá-las durante os *sweeps*. A cada *sweep* atualizamos e melhoramos a base, bem como as matrizes W . Podemos usar o estado fundamental obtido na parte infinita como “chute” para calcular o novo estado fundamental em cada processo de diagonalização dentro dos *sweeps*.

Os *sweeps* devem ser feitos até a convergência desejada, o que depende do tamanho do sistema. Essa convergência é medida calculando a diferença de energia do estado fundamental entre dois *sweeps*. No nosso caso, com 5 *sweeps* conseguimos obter uma diferença de energia entre os dois últimos *sweeps* na décima casa decimal.

B.3 t-DMRG: evolução temporal

Ao estudar dinâmica estamos interessados em obter a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo, isto é, queremos conhecer $|\Psi(t)\rangle$ dado um $|\Psi(0)\rangle$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Psi(0)\rangle. \quad (\text{B.7})$$

Uma vez que o estado inicial é o estado fundamental obtido no DMRG, para que o sistema evolua, devemos modificar o hamiltoniano H de modo que $|\Psi(0)\rangle$ não seja mais um autoestado de H .

No DMRG obtemos o subespaço de Hilbert que melhor descreve o estado fundamental; entretanto durante a evolução temporal o sistema pode explorar diferentes regiões do espaço de Hilbert. Portanto, para que não haja perda de precisão, o t-DMRG utiliza-se da atualização das bases ao longo da dinâmica.

Para calcular a evolução temporal, vamos dividir a dinâmica em pequenos intervalos de tempo τ , de modo que $\Delta t = n\tau$, onde n é o número de passos, como ilustrado na Figura 53.

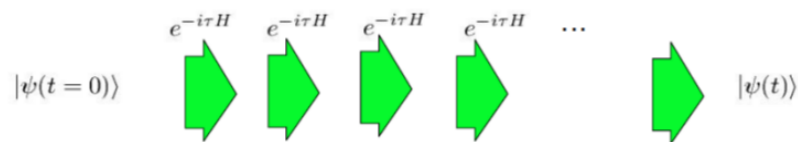


Figura 53 – Representação da evolução temporal dividida em n intervalos de tempos de tamanho τ . Figura retirada da referência [65].

Em seguida é necessário fazer a decomposição de Suzuki-Trotter (S-K). Para aplicar o operador evolução temporal e^{-iHt} no estado $|\Psi(0)\rangle$, temos que diagonalizar H , cuja dimensão depende do tamanho do sistema. Para contornar esse problema, o objetivo é escrever $e^{-iHt} = e^{-iH_1t}e^{-iH_2t} \dots e^{-iH_Nt}$, onde H_j são os hamiltonianos de interação entre

dois sítios, cuja dimensão é $d^2 \times d^2$. No entanto, como esses operadores não comutam, essa decomposição não é exata. A ideia então é reescrever H de uma forma adequada que minimize o erro na decomposição. Podemos reescrever $H = H_A + H_B$, onde H_A é o hamiltoniano de interação que envolve as chamadas ligações ímpares e H_B é o hamiltoniano de interação que leva em conta as ligações pares, como mostra a Figura 54.

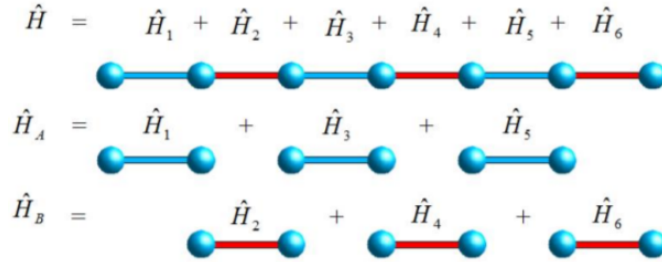


Figura 54 – Esquema da separação do hamiltoniano utilizado na decomposição S-T. O hamiltoniano é dividido em duas partes: H_A contém as interações das ligações ímpares e H_B as interações das ligações pares. Figura retirada da referência [122].

As decomposições de Suzuki-Trotter de 1ª e 2ª ordem são dadas, respectivamente, por

$$\begin{aligned} e^{-i\tau(H_A+H_B)} &= e^{-i\tau H_A} e^{-i\tau H_B} + O(\tau^2) \\ e^{-i\tau(H_A+H_B)} &= e^{-i\tau H_A/2} e^{-i\tau H_B} e^{-i\tau H_A/2} + O(\tau^3), \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

onde as exponenciais de H_A e H_B podem ser separadas em produtório de exponencias, uma vez que os termos que compõem H_A (H_B) comutam entre si. Embora ainda exista um erro de truncagem, a forma como a decomposição é feita faz com que o erro independa do tamanho do sistema e dependa somente de potências de τ .

O t-DMRG aproveita a estrutura dos *sweeps* para aplicar a decomposição de S-T. Abaixo listamos os passos do algoritmo

1. Obtenha o estado fundamental via DMRG. Termine a simulação com um *sweep* onde os sítios livres estão na borda, por exemplo;
2. Modifique o hamiltoniano para aquele através do qual o sistema vai evoluir;
3. “Desligue” a diagonalização, em seu lugar será aplicado o operador evolução temporal;
4. Aplique o operador de evolução temporal nos sítios livres e comece a fazer a varredura ao longo da cadeia:

Aplique nas ligações pares na ida;

Aplique nas ligações ímpares na volta;

Para cada aplicação do operador evolução temporal atualize a base;

5. Reescreva a função de onda nessa nova base;
6. Ao final de uma varredura completa, o sistema evoluiu um tempo τ , portanto temos que voltar ao passo nº 4 até alcançarmos o tempo desejado.

Alguns pontos devem ser destacados no *t*-DMRG: (1) usamos como estado inicial o estado fundamental obtido no DMRG; portanto, para que o sistema evolua, devemos mudar o hamiltoniano, seja por uma mudança local – justamente os casos que analisamos – seja por uma mudança global; (2) uma vez implementado o DMRG, a extensão *t*-DMRG é simples de ser obtida, pois usamos a mesma estrutura dos *sweeps*, substituindo a diagonalização pela aplicação do operador evolução temporal; (3) o erro na decomposição S-T fica em função do parâmetro τ e, quanto maior for a ordem, menor será o erro; (4) o número de vezes que devemos varrer a cadeia depende da ordem do S-T – no nosso caso, em que usamos a decomposição de 2ª ordem, tivemos que varrer a rede três vezes para evoluir τ .

A técnica DMRG é uma ferramenta poderosa no estudo de sistemas em uma dimensão. Para dar uma ideia dos números, no nosso primeiro artigo retivemos $m = 100$ estados para uma cadeia com 80 sítios e mantemos o erro da ordem de $\epsilon \sim 10^{-8}$.

APÊNDICE C – Método de interações repetidas, dissipadores e correntes de spin e energia

Este apêndice é dividido em três partes: primeiro, obteremos a equação mestra na forma de Lindblad usando o método das interações repetidas; em seguida deduziremos a expressão dos dissipadores da equação de Lindblad; e, por fim, apresentaremos os detalhes para obtenção das correntes de spin e energia.

C.1 Método de interações repetidas

Vamos apresentar agora uma derivação alternativa da equação mestra na forma de Lindblad para esse sistema que tratamos. Essa derivação é através de um esquema de interações repetidas. Vamos seguir os passos da dedução apresentada nas referências [60, 125].

A ideia é a seguinte: primeiro vamos considerar que nossa cadeia tem dois spins adicionais, que serão os spins 0 e $N + 1$. Esses spins se acoplam ao spin 1 e N , respectivamente, e por simplicidade vamos assumir $\Delta_{0,1} = \Delta_{N,N+1} = 0$. Portanto, o hamiltoniano do sistema fica

$$H_T = H + V_0 + V_N + h_0 \sigma_0^Z + h_{N+1} \sigma_{N+1}^Z, \quad (\text{C.1})$$

sendo H nosso hamiltoniano original, dado pela equação 4.12, e $V_i = \sigma_i^X \sigma_{i+1}^X + \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Y$ a interação entre os dois sítios extras com a cadeia.

Vamos assumir que no tempo $t = 0$ a cadeia está desacoplada dos sítios 0 e $N + 1$ e que, portanto, o estado inicial global pode ser escrito como um estado produto

$$\rho_T(0) = \rho_L \rho(0) \rho_R, \quad (\text{C.2})$$

onde ρ_L e ρ_R são as matrizes densidades dos spins 0 e $N + 1$, respectivamente. Vamos assumir também que em $t = 0$ os spins extras estão no estado de Gibbs, portanto podemos escrever

$$\rho_\nu = \frac{1 + f_\nu}{2} |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1 - f_\nu}{2} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|, \quad (\text{C.3})$$

onde $\nu = L, R$, $f_\nu = \tanh(\beta_\nu h_\nu)$ e β_ν é o inverso de temperatura. Note que $f_L = \langle \sigma_0^Z \rangle$ e $f_R = \langle \sigma_{N+1}^Z \rangle$, portanto através dessa derivação temos uma interpretação física de f . Caso fôssemos substituir os reservatórios por esses dois spins extras, o valor de f determinaria qual a magnetização média desses spins.

A dinâmica do sistema global, ρ_T , é dada pela equação de von Neumann [92]

$$\rho_T = -i[H_T, \rho_T], \quad (\text{C.4})$$

sendo que a evolução do estado global até um tempo t é obtida como $\rho_T(t) = U(t)\rho_T(0)U^\dagger(t)$, onde o operador de evolução temporal é dado por $U(t) = e^{-iH_T t}$. Aqui também fizemos $\hbar = 1$.

Vamos agora fazer o procedimento de interações repetidas. Primeiro vamos evoluir o estado inicial do sistema, dado pela equação C.2, até um tempo τ

$$\rho_T(\tau) = U(\tau)[\rho_L\rho(0)\rho_R]U^\dagger(\tau). \quad (\text{C.5})$$

No tempo $t = \tau$, removemos os spins extras 0 e $N + 1$, tomando o traço parcial sobre eles

$$\rho(\tau) = \text{tr}_{L,R}\{\rho_T(\tau)\} = \text{tr}_{L,R}\{U(\tau)[\rho_L\rho(0)\rho_R]U^\dagger(\tau)\}, \quad (\text{C.6})$$

e então adicionamos dois novos spins preparados no estado de Gibbs. Portanto, o estado do sistema estendido fica da forma

$$\rho_T(\tau) = \rho_L\rho(\tau)\rho_R, \quad (\text{C.7})$$

onde $\rho_{L,R}$ são dados pela equação C.3.

Esse procedimento se realiza de forma iterativa: novamente deixamos o estado global evoluir por mais um tempo τ , removemos então os spins extras e adicionamos outros dois novos spins no estado de Gibbs. Iterando n vezes, temos a seguinte relação de recursão para o estado do sistema

$$\rho_{n+1} = \text{tr}_{L,R}\{U(\tau)[\rho_L\rho_n\rho_R]U^\dagger(\tau)\}, \quad (\text{C.8})$$

onde $\rho_n = \rho(n\tau)$.

Esse é um mapeamento discreto da evolução temporal de $\rho(t)$ e podemos obter a equação mestra na forma de Lindblad, veja a equação 4.13, tomando o limite de $\tau \rightarrow 0$. Para isso, usamos a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff para reescrever o termo $e^{-iH_T\tau}\rho_T e^{iH_T\tau}$ que aparece implicitamente na equação C.8, portanto temos

$$e^{-iH_T\tau}\rho_T e^{iH_T\tau} = \rho_T - i\tau[H_T, \rho_T] - \frac{\tau^2}{2}[H_T, [H_T, \rho_T]] + \dots \quad (\text{C.9})$$

Inserindo esse resultado na equação C.8 e tomando os traços parciais, temos

$$\rho_{n+1} = tr_{L,R}\{\rho_T\} - i\tau tr_{L,R}\{[H_T, \rho_T]\} - \frac{\tau^2}{2}tr_{L,R}\{[H_T, [H_T, \rho_T]]\} + \dots \quad (C.10)$$

Lembrando que $\rho_T = \rho_L \rho_n \rho_R$, temos que o primeiro termo $tr_{L,R}\{\rho_T\} = \rho_n$ e o segundo termo é

$$\begin{aligned} tr_{L,R}\{[H_T, \rho_T]\} &= tr_{L,R}\{(H + V_0 + V_N + h_0\sigma_0^Z + h_{N-1}\sigma_{N+1}^Z)\rho_L\rho_n\rho_R\} \\ &- tr_{L,R}\{\rho_L\rho_n\rho_R(H + V_0 + V_N + h_0\sigma_0^Z + h_{N-1}\sigma_{N+1}^Z)\}, \\ &= [H, \rho_n], \end{aligned} \quad (C.11)$$

aqui usamos a propriedade cíclica do traço e observamos que os termos que não apresentam o hamiltoniano H se cancelam. O terceiro termo fica

$$tr_{L,R}\{[H_T, [H_T, \rho_T]]\} = tr_{L,R}\{[V_0, [V_0\rho_T]]\} + tr_{L,R}\{[V_N, [V_N, \rho_T]]\}. \quad (C.12)$$

Observe que, em primeira ordem, a interação com os spins extras é desprezível na dinâmica do sistema ρ ; a fim de termos uma contribuição finita para o acoplamento entre os spins extras e a cadeia quando tomarmos o limite $\tau \rightarrow 0$, reescrevemos V_i como

$$V_i = \sqrt{\frac{\gamma}{\tau}}(\sigma_i^X \sigma_{i+1}^X + \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Y), \quad (C.13)$$

onde γ é uma nova constante. Definindo

$$-\frac{\tau^2}{2}tr_{L,R}\{[V_0, [V_0, \rho_T]]\} \equiv \tau\mathcal{D}_L[\rho_n], \quad (C.14)$$

$$-\frac{\tau^2}{2}tr_{L,R}\{[V_N, [V_N, \rho_T]]\} \equiv \tau\mathcal{D}_R[\rho_n], \quad (C.15)$$

e substituindo esses resultados na equação C.8, temos

$$\rho_n + 1 = \rho_n - i\tau[H, \rho_n] + \tau(\mathcal{D}_L[\rho_n] + \mathcal{D}_R[\rho_n]); \quad (C.16)$$

dividindo por τ e tomando o limite $\tau \rightarrow 0$, obtemos a equação de Lindblad

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + \mathcal{D}_L[\rho] + \mathcal{D}_R[\rho]. \quad (C.17)$$

C.2 Dissipadores da equação de Lindblad

Na seção C.1 definimos os operadores de Lindblad como

$$-\frac{\tau^2}{2}tr_{L,R}\{[V_0, [V_0, \rho_T]]\} \equiv \tau\mathcal{D}_L[\rho_n], \quad (C.18)$$

$$-\frac{\tau^2}{2}tr_{L,R}\{[V_N, [V_N, \rho_T]]\} \equiv \tau\mathcal{D}_R[\rho_n]. \quad (C.19)$$

Desenvolvendo o traço do lado esquerdo da primeira equação, temos

$$tr_{L,R}\{[V_0, [V_0, \rho_T]]\} = tr_{L,R}\{V_0^2 \rho_T - 2V_0 \rho_T V_0 + \rho_T V_0^2\}. \quad (C.20)$$

Usando $V_0 = \sqrt{\frac{\gamma}{\tau}}(\sigma_0^X \sigma_1^X + \sigma_0^Y \sigma_1^Y)$ e lembrando que $\rho_T = \rho_L \rho \rho_R$ a equação acima fica da forma

$$\begin{aligned} tr_{L,R}\{[V_0, [V_0, \rho_T]]\} &= \frac{\gamma}{\tau} tr_{L,R}\{(\sigma_0^X \sigma_1^X + \sigma_0^Y \sigma_1^Y)(\sigma_0^X \sigma_1^X + \sigma_0^Y \sigma_1^Y) \rho_L \rho \rho_R \\ &\quad - 2(\sigma_0^X \sigma_1^X + \sigma_0^Y \sigma_1^Y) \rho_L \rho \rho_R (\sigma_0^X \sigma_1^X + \sigma_0^Y \sigma_1^Y) \\ &\quad + \rho_L \rho \rho_R (\sigma_0^X \sigma_1^X + \sigma_0^Y \sigma_1^Y)(\sigma_0^X \sigma_1^X + \sigma_0^Y \sigma_1^Y)\}. \end{aligned} \quad (C.21)$$

Sabendo que ρ_L é o estado do sítio extra $i = 0$, ρ é o estado da cadeia e ρ_R é o estado do sítio extra $i = N + 1$, podemos reescrever a equação acima como

$$\begin{aligned} tr_L\{[V_0, [V_0, \rho_T]]\} &= \frac{\gamma}{\tau} tr_L\{((\sigma_0^X)^2 \rho_L (\sigma_1^X)^2 + \sigma_0^X \sigma_0^Y \rho_L \sigma_1^X \sigma_1^Y + \sigma_0^Y \sigma_0^X \rho_L \sigma_1^Y \sigma_1^X + (\sigma_0^Y)^2 \rho_L (\sigma_1^Y)^2) \rho \\ &\quad - 2(\sigma_0^X \rho_L \sigma_0^X \sigma_1^X \rho \sigma_1^X + \sigma_0^X \rho_L \sigma_0^Y \sigma_1^X \rho \sigma_1^Y + \sigma_0^Y \rho_L \sigma_0^X \sigma_1^Y \rho \sigma_1^X + \sigma_0^Y \rho_L \sigma_0^Y \sigma_1^Y \rho \sigma_1^Y) \\ &\quad + \rho_L ((\sigma_0^X)^2 \rho (\sigma_1^X)^2 + \sigma_0^X \sigma_0^Y \rho \sigma_1^X \sigma_1^Y + \sigma_0^Y \sigma_0^X \rho \sigma_1^Y \sigma_1^X + (\sigma_0^Y)^2 \rho (\sigma_1^Y)^2)\}, \end{aligned} \quad (C.22)$$

onde usamos $tr_R\{\rho_R\} = 1$.

Reorganizando os termos da equação anterior de modo a deixar em evidência os termos que dependem de ρ_L temos

$$\begin{aligned} tr_L\{[V_0, [V_0, \rho_T]]\} &= \frac{\gamma}{\tau} tr_L\{((\sigma_0^X)^2 \rho_L)[(\sigma_1^X)^2 \rho + \rho (\sigma_1^X)^2 - 2\sigma_1^X \rho \sigma_1^X] \\ &\quad + (\sigma_0^X \sigma_0^Y \rho_L)[\sigma_1^X \sigma_1^Y \rho + \rho \sigma_1^X \sigma_1^Y - 2\sigma_1^Y \rho \sigma_1^X] \\ &\quad + (\sigma_0^Y \sigma_0^X \rho_L)[\sigma_1^Y \sigma_1^X \rho + \rho \sigma_1^Y \sigma_1^X - 2\sigma_1^X \rho \sigma_1^Y] \\ &\quad + ((\sigma_0^Y)^2 \rho_L)[(\sigma_1^Y)^2 \rho + \rho (\sigma_1^Y)^2 - 2\sigma_1^Y \rho \sigma_1^Y]\}. \end{aligned} \quad (C.23)$$

Utilizando as propriedades das matrizes de Pauli obtemos

$$\begin{aligned} tr_L\{[V_0, [V_0, \rho_T]]\} &= \frac{\gamma}{\tau} tr_L\{(\rho_L)[2\rho - 2\sigma_1^X \rho \sigma_1^X] \\ &\quad + (i\sigma_0^Z \rho_L)[2\sigma_1^X \sigma_1^Y \rho + 2\rho \sigma_1^X \sigma_1^Y - 2\sigma_1^Y \rho \sigma_1^X + 2\sigma_1^X \rho \sigma_1^Y] \\ &\quad + (\rho_L)[(2\rho - 2\sigma_1^Y \rho \sigma_1^Y)]\}. \end{aligned} \quad (C.24)$$

Como o spin extra é preparado no estado de equilíbrio, veja a equação C.3, temos que

$$\begin{aligned} tr_L\{\sigma_0^Z \rho_L\} &= tr\left\{\sigma_0^Z \left(\frac{1+f_L}{2} |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1-f_L}{2} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|\right)\right\}, \\ &= \frac{1+f_L}{2} - \frac{1-f_L}{2} = f_L. \end{aligned} \quad (C.25)$$

Substituindo esse resultado na equação C.24, obtemos

$$\begin{aligned} \text{tr}_L\{[V_0, [V_0, \rho_T]]\} &= \frac{\gamma}{\tau}[4\rho - 2\sigma_1^X \rho \sigma_1^X - 2\sigma_1^Y \rho \sigma_1^Y] \\ &+ (if_L)[2\sigma_1^X \sigma_1^Y \rho + 2\rho \sigma_1^X \sigma_1^Y - 2\sigma_1^Y \rho \sigma_1^X + 2\sigma_1^X \rho \sigma_1^Y]. \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

Voltando à equação C.18, temos agora que o dissipador tem a forma

$$\mathcal{D}_L[\rho_n] = -\gamma[2\rho - \sigma_1^X \rho \sigma_1^X - \sigma_1^Y \rho \sigma_1^Y + (if_L)(\sigma_1^X \sigma_1^Y \rho + \rho \sigma_1^X \sigma_1^Y - \sigma_1^Y \rho \sigma_1^X + \sigma_1^X \rho \sigma_1^Y)]. \quad (\text{C.27})$$

Reescrevendo a equação anterior em termos dos operadores $\sigma^\pm = \frac{\sigma^X \pm i\sigma^Y}{2}$, obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_L[\rho_n] &= \gamma\{(1 + f_L)(2\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - (\sigma_1^- \sigma_1^+ \rho + \rho \sigma_1^- \sigma_1^+)) \\ &+ (1 - f_L)(2\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - (\sigma_1^+ \sigma_1^- \rho + \rho \sigma_1^+ \sigma_1^-))\}. \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

Para obter o dissipador que atua na outra extremidade da cadeia o procedimento é o mesmo, nos dando como resultado

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_N[\rho_n] &= \gamma\{(1 + f_R)(2\sigma_N^+ \rho \sigma_N^- - (\sigma_N^- \sigma_N^+ \rho + \rho \sigma_N^- \sigma_N^+)) \\ &+ (1 - f_R)(2\sigma_N^- \rho \sigma_N^+ - (\sigma_N^+ \sigma_N^- \rho + \rho \sigma_N^+ \sigma_N^-))\}. \end{aligned} \quad (\text{C.29})$$

Por fim obtemos a equação 4.16 reescalando $\gamma = \frac{\varepsilon}{4}$.

C.3 Correntes de spin e energia

Agora obteremos as correntes de spin e energia, sendo que começaremos pela corrente de spin. Partindo da equação da continuidade, temos

$$\frac{d\langle \sigma_i^Z \rangle}{dt} = -\nabla \langle J_i^S \rangle = \langle J_{i-1}^S \rangle - \langle J_i^S \rangle, \quad (\text{C.30})$$

sendo $\langle J^S \rangle$ a de corrente de spin.

Desenvolvendo o lado esquerdo da equação acima, temos

$$\frac{d\langle \sigma_i^Z \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \text{tr}\{\rho \sigma_i^Z\} = \text{tr}\left\{\frac{d\rho}{dt} \sigma_i^Z\right\} = \text{tr}\{(-i[H, \rho] + \mathcal{D}_L[\rho] + \mathcal{D}_R[\rho])\sigma_i^Z\}, \quad (\text{C.31})$$

onde usamos as equações 4.9 e 4.13. O primeiro termo da última igualdade pode ser escrito como

$$\text{tr}\{(-i[H, \rho])\sigma_i^Z\} = -i \text{tr}\{(H\rho - \rho H)\sigma_i^Z\} = -i \text{tr}\{(\sigma_i^Z H - H\sigma_i^Z)\rho\} = i\langle [H, \sigma_i^Z] \rangle. \quad (\text{C.32})$$

Desenvolvendo a última igualdade, temos

$$i\langle [H, \sigma_k^Z] \rangle = i \left[\sum_{i=1}^{N-1} \left[\alpha \left(\sigma_i^X \sigma_{i+1}^X + \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Y \right) + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right] + \sum_{i=1}^N B_i \sigma_i^Z, \sigma_k^Z \right]. \quad (\text{C.33})$$

Usando as relações de comutação das matrizes de Pauli, $[\sigma_\alpha, \sigma_\beta] = 2i\varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma}\sigma_\gamma$, temos

$$\begin{aligned} i\langle[H, \sigma_k^Z]\rangle &= i\sum_i \alpha\langle([\sigma_i^X \sigma_{i+1}^X, \sigma_k^Z] + [\sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Y, \sigma_k^Z])\rangle, \\ &= i\sum_i -2i\alpha\langle(\sigma_i^X \sigma_{i+1}^Y \delta_{i+1,k} + \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^X \delta_{i,k} - \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^X \delta_{i+1,k} - \sigma_i^X \sigma_{i+1}^Y \delta_{i,k})\rangle, \\ &= 2\alpha\langle(\sigma_{k-1}^X \sigma_k^Y + \sigma_k^Y \sigma_{k+1}^X - \sigma_{k-1}^Y \sigma_k^X - \sigma_k^X \sigma_{k+1}^Y)\rangle, \\ &= 2\alpha\langle(\sigma_{k-1}^X \sigma_k^Y - \sigma_{k-1}^Y \sigma_k^X) - \langle\sigma_k^X \sigma_{k+1}^Y - \sigma_k^Y \sigma_{k+1}^X\rangle\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.34})$$

O termo envolvendo os dissipadores fica da forma

$$\begin{aligned} \text{tr}\{(\mathcal{D}_L[\rho] + \mathcal{D}_R[\rho])\sigma_i^Z\} &= \frac{\varepsilon}{4}\text{tr}\{((1 + f_L)[2\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - (\sigma_1^- \sigma_1^+ \rho + \rho \sigma_1^- \sigma_1^+)] \\ &\quad + (1 - f_L)[2\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - (\sigma_1^+ \sigma_1^- \rho + \rho \sigma_1^+ \sigma_1^-)] \\ &\quad + (1 + f_R)[2\sigma_N^+ \rho \sigma_N^- - (\sigma_N^- \sigma_N^+ \rho + \rho \sigma_N^- \sigma_N^+)] \\ &\quad + (1 - f_R)[2\sigma_N^- \rho \sigma_N^+ - (\sigma_N^+ \sigma_N^- \rho + \rho \sigma_N^+ \sigma_N^-)])\sigma_i^Z\}. \end{aligned} \quad (\text{C.35})$$

Para o caso em que $1 < i < N$ esse termo se anula. Isso pode ser verificado usando as propriedades cíclicas do traço e as relações de comutação das matrizes de Pauli.

Portanto, temos que

$$\frac{d\langle\sigma_i^Z\rangle}{dt} = 2\alpha\langle(\sigma_{i-1}^X \sigma_i^Y - \sigma_{i-1}^Y \sigma_i^X) - \langle\sigma_i^X \sigma_{i+1}^Y - \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^X\rangle\rangle, \quad \text{para } 1 < i < N. \quad (\text{C.36})$$

Comparando a equação C.30 com a equação C.36, temos que a corrente de spin pode ser escrita como

$$J_i^S = 2i(\sigma_{i-1}^X \sigma_i^Y - \sigma_{i-1}^Y \sigma_i^X). \quad (\text{C.37})$$

Vamos agora deduzir a expressão da corrente de energia. Para isso reescreveremos o hamiltoniano da equação 4.12 da seguinte forma

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} \varepsilon_{i,i+1} = \sum_{i=1}^{N-1} h_{i,i+1} + b_{i,i+1}, \quad (\text{C.38})$$

onde

$$\begin{aligned} h_{i,i+1} &= \alpha(\sigma_i^X \sigma_{i+1}^X + \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z, \\ b_{i,i+1} &= \frac{1}{2} [B_i \sigma_i^Z (1 + \delta_{i,1}) + B_{i+1} \sigma_{i+1}^Z (1 + \delta_{i,N})]. \end{aligned} \quad (\text{C.39})$$

Note que aqui nós escrevemos o hamiltoniano em função de uma soma de energias entre dois sítios e separamos essa soma em dois termos: um que é a contribuição da interação do tipo XXZ; e o outro é a contribuição do campo magnético externo. De forma análoga ao que foi feito na derivação da corrente de spin, vamos usar a equação da continuidade

$$\frac{d\langle\varepsilon_{i,i+1}\rangle}{dt} = -\nabla\langle J^E\rangle = \langle J_i^E\rangle - \langle J_{i+1}^E\rangle, \quad (\text{C.40})$$

e assim obter a corrente de energia.

Pela equação da continuidade temos que a variação da energia entre dois sítios ocorre devido a uma corrente, que nesse caso chamamos de corrente de energia $\langle J^E \rangle$.

Desenvolvendo o termo do lado direito da equação C.40, temos

$$\frac{d\langle \varepsilon_{i,i+1} \rangle}{dt} = tr \left(\frac{d\rho}{dt} \varepsilon_{i,i+1} \right) = -i tr \{ [H, \rho] \varepsilon_{i,i+1} \} + tr \{ (\mathcal{D}_L[\rho] + \mathcal{D}_R[\rho]) \varepsilon_{i,i+1} \}. \quad (C.41)$$

Os cálculos realizados aqui são semelhantes ao que foram feitos para a corrente de spin. Seguindo os passos apresentados na equação C.32, o primeiro termo da última igualdade fica da forma

$$-i tr \{ [H, \rho] \varepsilon_{i,i+1} \} = i \langle [H, \varepsilon_{i,i+1}] \rangle; \quad (C.42)$$

podemos mostrar que

$$\begin{aligned} [H, \varepsilon_{k,k+1}] &= \left[\sum_{i=1}^{N-1} \varepsilon_{i,i+1}, \varepsilon_{k,k+1} \right] \\ &= [\varepsilon_{i,i+1}, \varepsilon_{k,k+1}] \delta_{i+1,k} + [\varepsilon_{i,i+1}, \varepsilon_{k,k+1}] \delta_{i,k} + [\varepsilon_{i,i+1}, \varepsilon_{k,k+1}] \delta_{i,k+1}, \\ &= [\varepsilon_{k-1,k}, \varepsilon_{k,k+1}] - [\varepsilon_{k,k+1}, \varepsilon_{k+1,k+2}]. \end{aligned} \quad (C.43)$$

Desenvolvendo o segundo termo da equação C.41, temos

$$\begin{aligned} tr \{ (\mathcal{D}_L[\rho] + \mathcal{D}_R[\rho]) \varepsilon_{i,i+1} \} &= \frac{\varepsilon}{4} tr \{ ((1 + f_L)[2\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - (\sigma_1^- \sigma_1^+ \rho + \rho \sigma_1^- \sigma_1^+)] \\ &\quad + (1 - f_L)[2\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - (\sigma_1^+ \sigma_1^- \rho + \rho \sigma_1^+ \sigma_1^-)] \\ &\quad + (1 + f_R)[2\sigma_N^+ \rho \sigma_N^- - (\sigma_N^- \sigma_N^+ \rho + \rho \sigma_N^- \sigma_N^+)] \\ &\quad + (1 - f_R)[2\sigma_N^- \rho \sigma_N^+ - (\sigma_N^+ \sigma_N^- \rho + \rho \sigma_N^+ \sigma_N^-)] \} \varepsilon_{i,i+1}. \end{aligned} \quad (C.44)$$

Usando as propriedades cíclicas do traço, vemos que esse termo é nulo para $1 < i < N - 1$.

Portanto, a equação C.41 pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \varepsilon_{i,i+1} \rangle}{dt} &= i \langle [H, \varepsilon_{i,i+1}] \rangle + tr \{ (\mathcal{D}_L[\rho] \varepsilon_{1,2}) \delta_{i,1} + tr \{ \mathcal{D}_R[\rho] \} \varepsilon_{N-1,N} \} \delta_{i+1,N}, \\ &= i \langle [\varepsilon_{i-1,i}, \varepsilon_{i,i+1}] \rangle \delta_{i,j \neq 1} - i \langle [\varepsilon_{i,i+1}, \varepsilon_{i+1,i+2}] \rangle \delta_{i,j \neq N-1} \\ &\quad + tr \{ \mathcal{D}_L[\rho] \varepsilon_{1,2} \} \delta_{i,1} + tr \{ \mathcal{D}_R[\rho] \varepsilon_{N-1,N} \} \delta_{i+1,N}, \quad 1 \leq i \leq N - 1. \end{aligned} \quad (C.45)$$

Comparando a equação C.40 com a equação C.45, definimos a corrente de energia como

$$\langle J_i^E \rangle = i \langle [\varepsilon_{i-1,i}, \varepsilon_{i,i+1}] \rangle, \quad 1 < i < N. \quad (C.46)$$

Observe que essa definição não se aplica aos sítios das extremidades. Podemos definir a corrente de energia que envolve os sítios em contato com os reservatórios como

$$\begin{aligned} \langle J_1^E \rangle &= tr \{ \mathcal{D}_L[\rho] \varepsilon_{1,2} \} \\ \langle J_N^E \rangle &= tr \{ \mathcal{D}_R[\rho] \varepsilon_{N-1,N} \}. \end{aligned} \quad (C.47)$$

Vamos agora desenvolver o comutador da equação C.46 e obter uma equação para a corrente de energia para o *bulk* da cadeia

$$\begin{aligned} [\varepsilon_{i-1,i}, \varepsilon_{i,i+1}] &= [h_{i-1,i} + b_{i-1,i}, h_{i,i+1} + b_{i,i+1}] \\ &= [h_{i-1,i}, h_{i,i+1}] + [h_{i-1,i}, b_{i,i+1}] + [b_{i-1,i}, h_{i,i+1}] + [b_{i-1,i}, b_{i,i+1}], \end{aligned} \quad (\text{C.48})$$

note que o último termo da igualdade é identicamente nulo. O primeiro termo da igualdade envolve somente as interações do tipo XXZ e os termos do meio se assemelham ao termo da corrente de spin, veja a primeira linha da equação C.34. Portanto, a corrente de energia pode ser dividida em dois termos: o termo XXZ e o termo de campo, ou seja,

$$\langle J_i^E \rangle = \langle J_i^{XXZ} \rangle + \langle J_i^B \rangle. \quad (\text{C.49})$$

Primeiro vamos tratar do comutador que envolve o termo XXZ

$$\begin{aligned} [h_{i-1,i}, h_{i,i+1}] &= \alpha^2[\sigma_{i-1}^X \sigma_i^X, \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Y] + \alpha^2[\sigma_{i-1}^Y \sigma_i^Y, \sigma_i^X \sigma_{i+1}^X] \\ &+ \alpha[\sigma_{i-1}^X \sigma_i^X, \Delta_{i,i+1} \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z] + \alpha[\sigma_{i-1}^Y \sigma_i^Y, \Delta_{i,i+1} \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z] \\ &+ \Delta_{i-1,i}[\sigma_{i-1}^Z \sigma_i^Z, \alpha \sigma_i^X \sigma_{i+1}^X] + \Delta_{i-1,i}[\sigma_{i-1}^Z \sigma_i^Z, \alpha \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Y]. \end{aligned} \quad (\text{C.50})$$

Usando as relações de comutação das matrizes de Pauli, obtemos

$$\begin{aligned} [h_{i-1,i}, h_{i,i+1}] &= 2i\alpha(\alpha(\sigma_{i-1}^X \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Y - \sigma_{i-1}^Y \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^X)) \\ &+ \Delta_{i,i+1} \sigma_{i-1}^Y \sigma_i^X \sigma_{i+1}^Z - \Delta_{i,i+1} \sigma_{i-1}^X \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Z \\ &+ \Delta_{i-1,i} \sigma_{i-1}^Z \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^X - \Delta_{i-1,i} \sigma_{i-1}^Z \sigma_i^X \sigma_{i+1}^Y. \end{aligned} \quad (\text{C.51})$$

Portanto, o termo XXZ fica da forma

$$\begin{aligned} \langle J_i^{XXZ} \rangle &= i\langle [h_{i-1,i}, h_{i,i+1}] \rangle, \\ &= 2\alpha(\alpha(\sigma_{i-1}^Y \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^X - \sigma_{i-1}^X \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Y)) \\ &+ \Delta_{i-1,i} \sigma_{i-1}^Z \sigma_i^X \sigma_{i+1}^Y - \Delta_{i-1,i} \sigma_{i-1}^Z \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^X \\ &+ \Delta_{i,i+1} \sigma_{i-1}^X \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Z - \Delta_{i,i+1} \sigma_{i-1}^Y \sigma_i^X \sigma_{i+1}^Z. \end{aligned} \quad (\text{C.52})$$

Vamos agora passar aos comutadores envolvidos no termo $\langle J^B \rangle$

$$\begin{aligned} [h_{i-1,i}, b_{i,i+1}] &= \left[\alpha(\sigma_{i-1}^X \sigma_i^X + \sigma_{i-1}^Y \sigma_i^Y) + \Delta_{i-1,i} \sigma_{i-1}^Z \sigma_i^Z, \frac{1}{2}(B_i \sigma_i^Z + B_{i+1} \sigma_{i+1}^Z) \right] \\ &= \frac{\alpha}{2} B_i \left(\sigma_{i-1}^X [\sigma_i^X, \sigma_i^Z] + \sigma_{i-1}^Y [\sigma_i^Y, \sigma_i^Z] \right), \\ &= i \frac{\alpha}{2} \left(B_i 2 \{ \sigma_{i-1}^Y \sigma_i^X - \sigma_{i-1}^X \sigma_i^Y \} \right); \end{aligned} \quad (\text{C.53})$$

$$\begin{aligned} [b_{i-1,i}, h_{i,i+1}] &= \left[\frac{1}{2}(B_{i-1} \sigma_{i-1}^Z + B_i \sigma_i^Z), \alpha(\sigma_i^X \sigma_{i+1}^X + \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^Y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z \right] \\ &= \frac{\alpha}{2} B_i \left([\sigma_i^Z, \sigma_i^X] \sigma_{i+1}^X + [\sigma_i^Z, \sigma_i^Y] \sigma_{i+1}^Y \right), \\ &= i \frac{\alpha}{2} \left(B_i 2 \{ \sigma_i^Y \sigma_{i+1}^X - \sigma_i^X \sigma_{i+1}^Y \} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.54})$$

Usando a equação C.37 e substituindo esses resultados explicitamente no termo $\langle J^B \rangle$, obtemos

$$\begin{aligned}\langle J_i^B \rangle &= i\langle [h_{i-1,i}, b_{i,i+1}] \rangle + i\langle [b_{i-1,i}, h_{i,i+1}] \rangle, \\ &= \frac{B_i}{2}(J_i^S + J_{i+1}^S),\end{aligned}\tag{C.55}$$

onde fizemos $\alpha = 1$.

APÊNDICE D – Resultados complementares sobre o controle e manipulação da corrente de energia

Na seção 5.2 apresentamos os resultados sobre o controle e manipulação da corrente de energia para uma cadeia com $N = 7$ sítios usando assimetria acumulativa. Apresentaremos aqui, de forma sucinta, os resultados, envolvendo essa questão, para uma cadeia com $N = 3$ sítios e para uma cadeia com $N=7$ sítios usando assimetria delimitada.

D.1 Cadeia com $N = 3$ sítios

Vimos no texto principal desta tese que as correntes são sensíveis a escolha de parâmetros, no entanto, temos muitos parâmetros livres para varrer. A forma mais simples que encontramos para variá-los foi em uma cadeia com $N = 3$ sítios. Portanto, foi a partir desse tamanho de sistema que eles foram definidos. De forma análoga a que foi apresentada na seção 5.2, para investigar o controle e a manipulação da corrente de energia via campo magnético externo, comparamos a situação de campo nulo com a cadeia com campo assimétrico.

A Figura 55 apresenta as correntes de spin, painéis (a) e (c), e energia, painéis (b) e (d) em função de Δ . As curvas contínuas indicam as correntes para $f = 0.448$, enquanto que as tracejadas são para $f = -0.448$. Os demais parâmetros são os mesmos: $\delta = 0.15$, $h = -0.94$ e $\zeta = -2.0$. Vale mencionar que para esse tamanho de sistema não há diferença entre as assimetria delimitada e acumulativa.

Nos painéis (a) e (b) da Figura 55, temos as correntes de spin e energia, respectivamente, sem campo magnético externo. Observe que todos os fenômenos relacionados com a ausência de campo se mantêm: não temos retificação na corrente de spin, e a corrente de energia se propaga no mesmo sentido independente do sinal de f (*one-way street*). A simetria da corrente de energia com relação a Δ para campo nulo se mantém, isto é, $J^E(\Delta) = J^E(-\Delta)$. Como queremos investigar a questão da manipulação para cadeias maiores, e lembrando que para cada valor de Δ temos uma cadeia diferente, escolhemos então, um valor para o qual temos o maior valor na corrente de energia, isso ocorre para $\Delta = \pm 4$.

Nos painéis (c) e (d) da Figura 55, ligamos o campo assimétrico ao longo da cadeia. Note que as curvas se modificaram e todas as simetrias foram quebradas. Agora temos

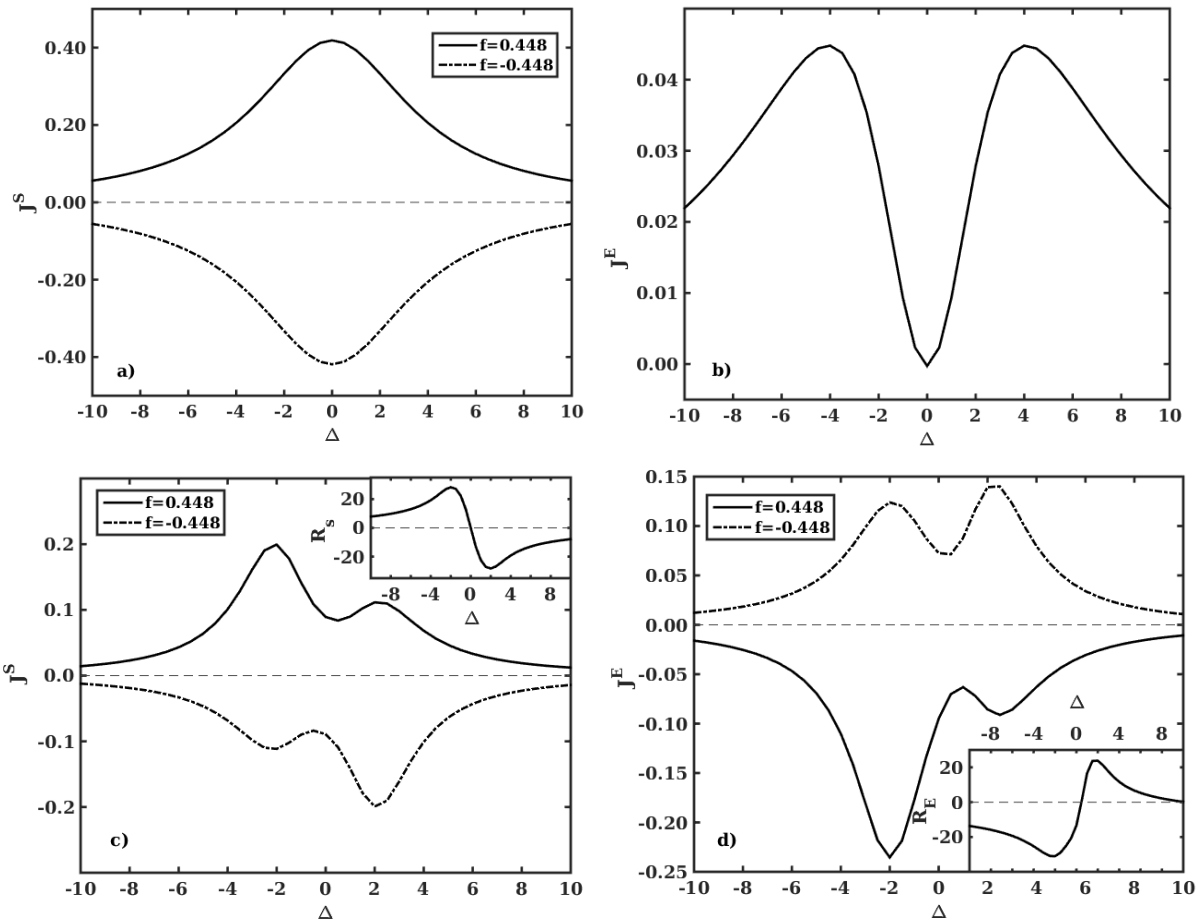


Figura 55 – Correntes de spin, painéis (a) e (c), e energia, painéis (b) e (d), para $N = 3$ sítios e $\delta = 0.15$ em função de Δ . Nos painéis (a) e (b) temos que $h = 0.0$ e $\zeta = 0.0$. Nos painéis (c) e (d) temos $h = -0.94$ e $\zeta = -2.0$. Nos *insets* temos as retificações das respectivas correntes.

retificação na corrente de spin, apresenta no *inset*, já na corrente de energia as curvas se separaram e os máximos mudaram de posição. Além de fazer a corrente de spin e energia se propagarem em sentidos contrários, temos que o sinal das respectivas retificações são opostos, por exemplo, para $\Delta = 4$ a retificação da corrente de spin é negativa enquanto que a da corrente de energia é positiva, veja os *insets*. Isso tudo foi realizado via campo magnético externo.

D.2 Cadeia com $N = 7$ sítios

Vamos agora apresentar os resultados para uma cadeia com $N = 7$ sítios usando assimetria delimitada em Δ . Note que agora há diferença entre a assimetria acumulativa e delimitada, no primeiro caso, que foi apresentado no corpo principal da tese, o sistema se torna mais assimétrico à medida que aumentamos seu tamanho, enquanto que no segundo caso a assimetria do sistema se torna mais suave.

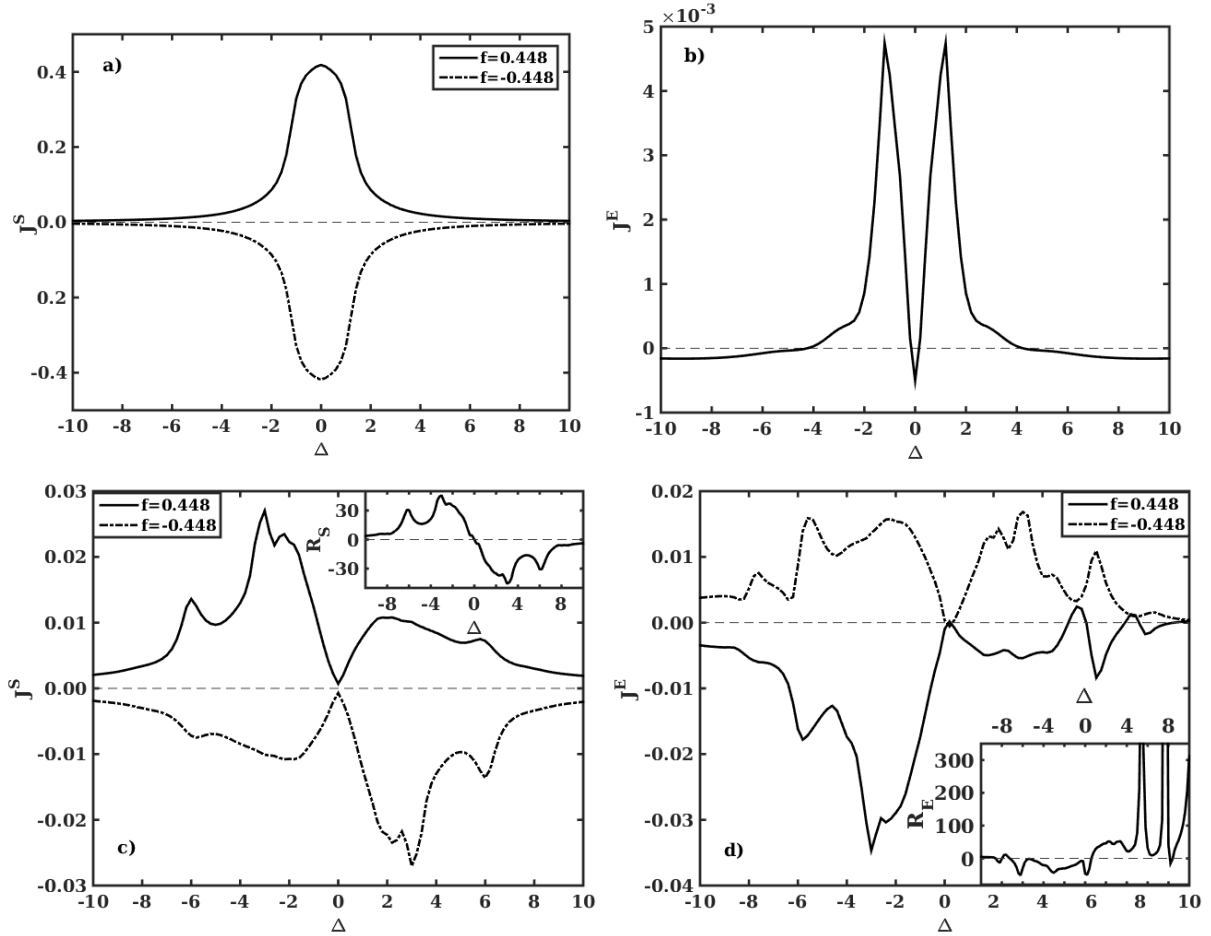


Figura 56 – Correntes de spin, painéis (a) e (c), e energia, painéis (b) e (d), para $N = 7$ sítios e $\delta = 0.15$ em função de Δ usando a assimetria delimitada. Nos painéis (a) e (b) temos que $h = 0.0$ e $\zeta = 0.0$. Nos painéis (c) e (d) temos $h = -0.94$ e $\zeta = -2.0$. Nos *insets* temos as retificações das respectivas correntes.

O procedimento é o mesmo, comparamos as curvas das correntes para o caso sem campo externo com o caso em que ligamos o campo. A Figura 56 apresenta as correntes de spin, painéis (a) e (c), e as correntes de energia, painéis (b) e (d), em função de Δ . As curvas contínuas são para $f = 0.448$ enquanto que as curvas tracejadas correspondem à inversão dos reservatórios. Os demais parâmetros são os mesmos: $\delta = 0.15$, $h = -0.94$ e $\zeta = -2.0$.

Vemos que os resultados para campo nulo, painéis (a) e (b) da Figura 56, se mantêm. Não temos retificação na corrente de spin, observamos o fenômeno de *one-way street* na corrente de energia e temos que a corrente de energia é uma função par de Δ .

Ao ligar o campo assimétrico, painéis (c) e (d) da Figura 56, temos que todas as simetrias são quebradas e observamos retificação em ambas correntes, veja os *insets*. As curvas da corrente de energia se separam e, para maioria dos valores de Δ que estamos considerando, a corrente de spin se propaga no sentido contrário da corrente de energia. Isso é devido ao campo magnético externo que aplicamos sobre a cadeia. Portanto, assim

como foi visto para o caso da assimetria acumulativa, conseguimos manipular e controlar a corrente de energia via mecanismo externo.

D.2.1 Mudança do grau de assimetria para assimetria delimitada

Vamos agora variar o tamanho do sistema, quanto maior o tamanho do sistema mais suave é a assimetria intrínseca. A Figura 57 apresenta as correntes de spin e energia na ausência de campo, nos painéis (a) e (b), respectivamente, em função do tamanho da cadeia. Já os painéis (c) e (d) correspondem às correntes de spin e energia, respectivamente, na presença de campo magnético assimétrico. As curvas contínuas correspondem a $f = 0.448$, enquanto as curvas tracejadas correspondem à inversão dos reservatórios, ou seja, $f = -0.448$.

De acordo com os painéis (a) e (b) da Figura 57, vemos que, para esse regime de parâmetros escolhidos, as correntes decaem com o tamanho da cadeia. A corrente de spin decai de forma mais suave, enquanto que a corrente de energia tem uma diminuição mais abrupta. Note que os resultados para campo nulo permanecem variando o tamanho do sistema.

Nos painéis (c) e (d) da Figura 57 ligamos o campo assimétrico na cadeia. Observe que novamente as correntes diminuem de intensidade à medida que a cadeia cresce, no entanto elas decaem de forma diferente de acordo com o sentido de propagação. A corrente de spin, por exemplo, decai mais lentamente quando se propaga da direita para esquerda, curva vermelha do painel (c), do que quando se propaga no sentido contrário. É exatamente por ter essa diferença na intensidade das correntes de acordo com seu sentido de propagação que observamos retificação. A retificação está apresentada no *inset*, observe que, apesar dela oscilar, o seu valor não diminui à medida que crescemos o tamanho do sistema.

Note no painel (d) da Figura 57 que a corrente de energia decai com o tamanho da cadeia, porém os seus valores são maiores comparados à situação sem campo, veja o painel (b) da mesma figura. Isso significa que o campo externo, de certa forma, amplificou um pouco a corrente de energia. Assim como é visto na corrente de spin, a retificação da corrente de energia não decai para o tamanho de sistema que estamos considerando, veja o *inset*.

Assim como foi feito para o caso da cadeia com $N = 3$ e $N = 7$ sítios, com a aplicação devida de um campo externo, conseguimos inverter o sentido de propagação da corrente de energia em relação à corrente de spin para um dado sinal de f , compare os painéis (c) e (d) da Figura 56. Essa inversão na propagação das correntes também implica na inversão do sinal da retificação. Observe que a corrente de spin tem uma retificação negativa, enquanto que a corrente de energia tem uma retificação positiva, ou seja, é mais fácil a corrente de spin se propagar para a esquerda, enquanto que a corrente de energia

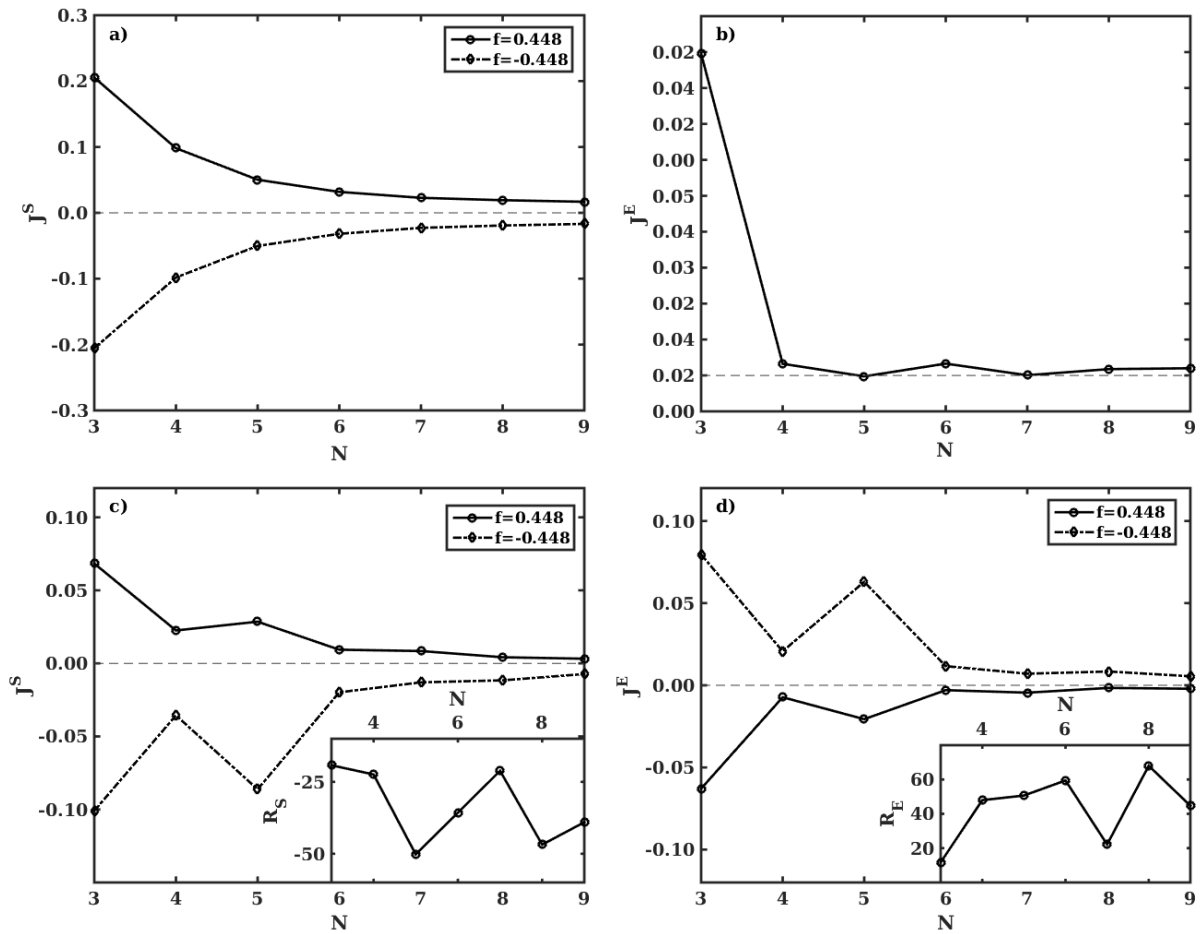


Figura 57 – Correntes de spin, painéis (a) e (c), e energia, painéis (b) e (d), para $\Delta = 4$ e $\delta = 0.15$ em função de N usando assimetria delimitada. Nos painéis (a) e (b) temos que $h = 0.0$ e $\zeta = 0.0$. Nos painéis (c) e (d) temos $h = -0.94$ e $\zeta = -2.0$. Nos *insets* temos as retificações das respectivas correntes.

flui melhor para a direita. Isso indica que conseguimos manipular a corrente de energia e, por consequência, a retificação via aplicação de um campo mesmo para cadeias maiores.

D.2.2 Evolução temporal das correntes de spin e energia

Vamos agora discutir como foram obtidos os resultados para os tamanhos de cadeias em que tivemos que fazer evolução temporal para obter o estado estacionário, ou seja, para $N = 8$ e $N = 9$ sítios.

A Figura 58 apresenta a evolução temporal da corrente de spin para uma cadeia com $N = 9$ sítios, com $\Delta = 4$, $\delta = 0.15$, $h = -0.94$, $\zeta = -2.0$ e $f = -0.448$, a assimetria usada foi a delimitada. No painel (a), temos a evolução da corrente de spin para quatro pares de sítios, lembrando que a corrente de spin envolve sempre dois sítios. Por exemplo, o par $i = 2$ corresponde à corrente entre os sítios 2 e 3, o mesmo é válido para os outros pares apresentados no gráfico. À primeira impressão, a corrente estaciona para $t > 100$. No entanto, ao ampliarmos a região para $t > 100$ vemos, no *inset*, que as correntes estão

próximas, porém ainda não estacionaram. Após essa primeira simulação, onde são dados 1800 passos de tempo, analisamos se a corrente é homogênea ao longo da cadeia. Caso não seja, fazemos outra simulação, com o estado inicial sendo o estado final da primeira simulação, e deixamos o sistema evoluir por mais 2000 passos de tempo. Os resultados dessa última simulação estão representados no painel (b). Observe que agora temos a corrente de spin entre todos os pares de sítios. Temos que, para $t > 150$, a corrente estabiliza em torno de um certo valor para a maioria dos pares de sítios, sendo que apenas para um par o valor de convergência fica mais distante dos demais.

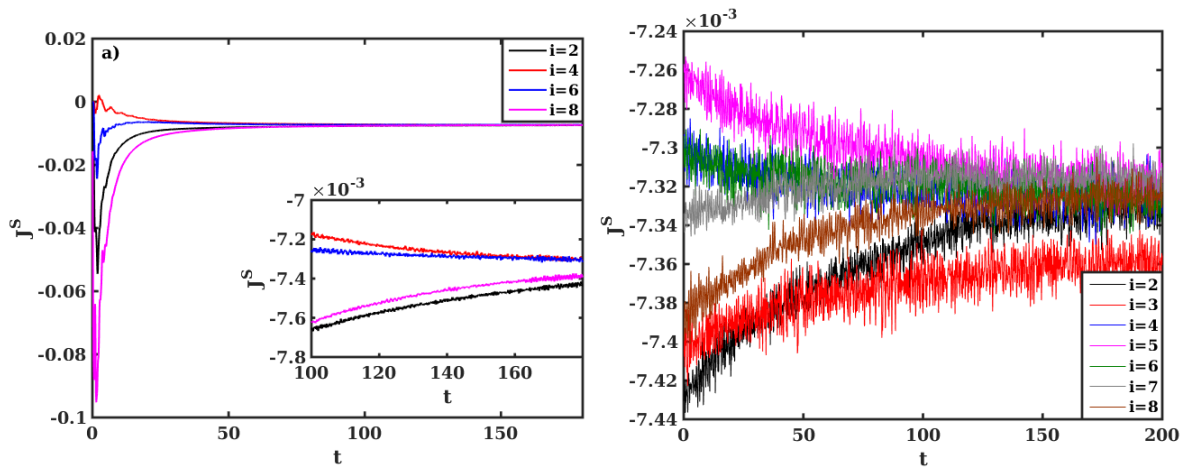


Figura 58 – Evolução temporal da corrente de spin para uma cadeia de $N = 9$ sítios com $\Delta = 4$, $\delta = 0.15$, $h = -0.94$, $\zeta = -2.0$ e $f = -0.448$. No painel (a) temos a primeira simulação, enquanto que no painel (b) temos o refinamento.

Para obter o valor de convergência da corrente entre cada par de sítios, fizemos uma média temporal nos últimos 500 passos de tempo, e então comparamos os valores. Para o caso particular apresentado no painel (b) da Figura 58, obtivemos os seguintes valores de corrente ao longo da cadeia

$$J^S = [-0.0073 \quad -0.0073 \quad -0.0074 \quad -0.0073 \quad -0.0073 \quad -0.0073 \quad -0.0073 \quad -0.0073]. \quad (\text{D.1})$$

Note que há uma boa convergência com exceção de um único par de sítios. Ainda assim esta diferença está na quarta casa decimal. Tendo em vista esta distribuição de correntes fizemos uma média, agora sobre a distribuição, e o valor obtido da média é o que utilizamos nos gráficos para $N = 9$ sítios. Para esse caso temos que $J^S = -0.0073$ no estado assintótico.

Fizemos o mesmo procedimento para a corrente de energia. A Figura 59 apresenta a evolução temporal de J^E para essa mesma cadeia. No painel (a) temos a evolução para alguns trios de sítios, lembrando que a corrente de energia depende de três sítios; no caso $i = 2$, por exemplo, estão envolvidos os três primeiros sítios. Observe que, assim como para a corrente de spin, a primeira impressão é que a corrente estaciona para $t > 100$.

No entanto, ao ampliarmos essa região como mostrado no *inset*, vemos que as correntes ainda não convergiram. Como foi discutido no caso anterior, nessa situação deixamos o sistema evoluir por mais 2000 passos de tempo. Na realidade, o que fazemos é: ao final de cada simulação computamos os valores das correntes de spin e energia; se alguma delas ainda não estacionou, simulamos novamente, até alcançar a convergência desejada. Essas simulações extras são de certa forma um refinamento.

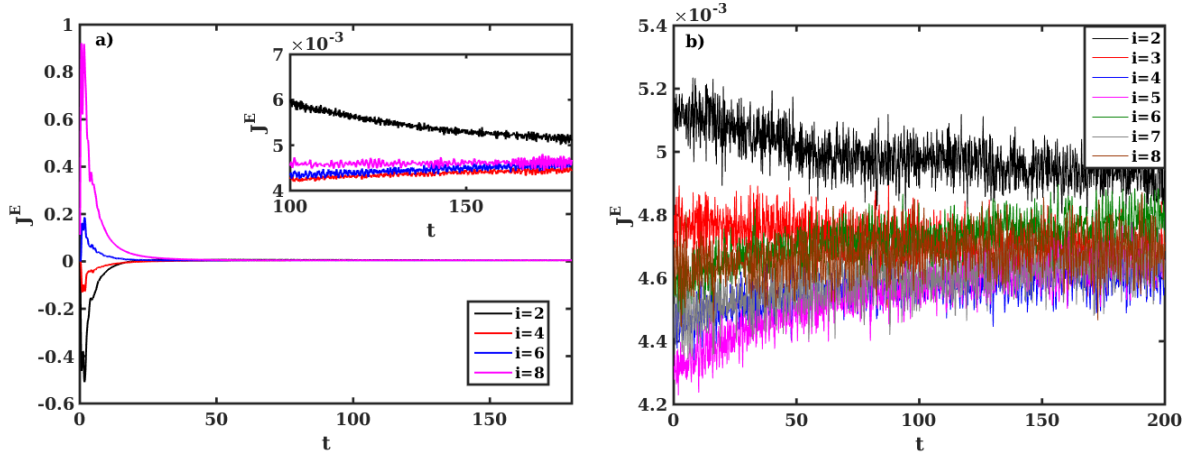


Figura 59 – Evolução temporal da corrente de energia para uma cadeia de $N = 9$ sítios com $\Delta = 4$, $\delta = 0.15$, $h = -0.94$, $\zeta = -2.0$ e $f = -0.448$. No painel (a) temos a primeira simulação, enquanto que no painel (b) temos o refinamento.

No painel (b) da Figura 59, temos os resultados do refinamento de $J^E(t)$ para todos os trios de sítios da cadeia. Observe que, a menos de um trio de sítios (correspondente ao caso $i = 2$), a corrente de energia ao longo da cadeia tende a um intervalo de pequenos valores. Essa convergência não é tão boa quanto a observada na corrente de spin. Realizando o mesmo procedimento anterior, isto é, calculando a média temporal nos últimos 500 passos de tempo, obtivemos a seguinte distribuição de corrente ao longo da cadeia

$$J^E = [0.0049 \quad 0.0047 \quad 0.0046 \quad 0.0046 \quad 0.0048 \quad 0.0046 \quad 0.0047]. \quad (\text{D.2})$$

A distribuição não é tão homogênea quanto a observada na corrente de spin, no entanto a variação está na quarta casa decimal. Fazendo a média sobre a distribuição obtemos $J^E = 0.0047$, que foi o valor utilizado no gráfico para $N = 9$. Poderíamos fazer mais um refinamento, mas acreditamos que não iríamos obter uma grande melhoria no valor da corrente.

No caso de todos os pontos para $N > 7$ sítios tivemos que fazer evolução temporal, sendo que os valores de correntes do estado estacionário foram obtidos da forma descrita acima. Observamos que, à medida que aumentamos o tamanho da cadeia, mais difícil fica a convergência das correntes. Esse foi o motivo de não estendermos a cadeia para tamanhos maiores. Um outro ponto que vale ressaltar é que se diminuísimos o valor de f temos um ganho na velocidade da simulação, porém, para o jogo de parâmetros considerado, a

convergência não fica razoável, além da corrente ter um valor muito pequeno, de modo que a incerteza com relação à distribuição das correntes ao longo da cadeia fica da ordem do valor da corrente. Esse é mais um ponto que justifica a escolha de f .