

Alessandra Chioquetta

Retificação Induzida por geometria em Redes de Spin

Dissertação 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 Mestre em Ciências.

Orientador: Raphael Campos Drumond

Belo Horizonte

2020

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

C539r Chioquetta, Alessandra.
Retificação induzida por geometria em redes de spin / Alessandra Chioquetta.
– 2020.
69f., enc. : il.

Orientador: Raphael Campos Drumond.
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais,
Departamento de Física.
Bibliografia: f. 59-62.

1. Retificação. 2. Sistemas quânticos. 3. Geometria.
I. Título. II. Drumond, Raphael Campos. III. Universidade Federal de Minas
Gerais, Departamento de Física.

CDU – 530.145 (043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-Graduação em Física

A presente dissertação, intitulada “**Retificação Induzida por Geometria em Redes de Spin**” de autoria de **ALESSANDRA CHIOQUETTA**, submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **MESTRE EM FÍSICA** em 14 de agosto de 2020.

Belo Horizonte, 14 de agosto de 2020.

Prof. Raphael Campos Drumond

Orientador do estudante

Departamento de Matemática/UFMG

Prof. Pablo Lima Saldanha

Departamento de Física/UFMG

Prof. Gabriel Teixeira Landi

Instituto de Física/USP



Documento assinado eletronicamente por **Alessandra Chioquetta, Usuário Externo**, em 17/08/2020, às 13:50, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Gabriel Teixeira Landi, Usuário Externo**, em 17/08/2020, às 15:00, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Pablo Lima Saldanha, Servidor(a)**, em 18/08/2020, às 11:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Raphael Campos Drumond, Professor do Magistério Superior**, em 18/08/2020, às 11:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0217328** e o código CRC **EC38F48D**.

Referência: Processo nº 23072.222609/2020-41

SEI nº 0217328

Agradecimentos

Primeiramente gostaria de agradecer aos meus pais que, além de todo o incentivo e apoio, se fizeram presentes mesmo estando fisicamente distantes.

Aos meus familiares, que de alguma forma estiveram comigo durante esse período.

Aos meus amigos e colegas, pelas ideias, discussões, momentos de lazer e também pelos inúmeros cafezinhos.

Ao Raphael Drumond, agradeço pela excelente orientação, solicitude e sugestões, que foram essenciais para a realização desse trabalho.

Aos professores e demais funcionários dessa universidade, que colaboraram de alguma maneira para minha formação.

E agradeço a CAPES pelo apoio financeiro

Muito obrigada a todos!

Resumo

O ponto central desta dissertação é explorar como a geometria em uma rede de spins pode influenciar nas correntes de magnetização, e se a imposição de uma assimetria geométrica é capaz de induzir a ocorrência de retificação. São investigadas redes de spin sem contato com reservatórios, descritos pelo modelo XX, com geometria triangular e sem campos magnéticos externos. Foram analisadas as ocupações médias de spin em cada sítio para diferentes estados iniciais através de simulações numéricas no intuito de verificar propensões causadas pela geometria. Em todos os casos abordados foram observadas uma quantidade maior de ocupações no lado em que o sistema apresentava um número maior de sítios. Em seguida são abordadas redes em contato com reservatórios de magnetização, descritos pelo modelo XX e XXZ, com diferentes geometrias, incluindo casos simétricos e assimétricos, com suas dinâmicas regidas pela equação mestra de Lindblad. Para esses foram incluídos campos magnéticos externos homogêneos e não-homogêneos e também diferentes configurações dos reservatórios nos quais o sistema é acoplado. Foram calculadas, através de simulações numéricas, as correntes nessas redes e também coeficientes de retificação para cada caso. Foi observada a ocorrência de retificação em todos os casos geometricamente assimétricos em que um campo não-homogêneo é aplicado, tanto no modelo XX quanto no XXZ.

Palavras-chave: Retificação, sistemas quânticos fechados, sistemas quânticos abertos, redes de spin bidimensionais.

Abstract

The main point of this thesis is to explore how the geometry of a spin lattice can influence spin currents, and if a geometric asymmetry is able to induce rectification. Spin lattices in quantum closed systems, described by the XX model, with triangular geometry and without external magnetic field applied are investigated. The average occupation of spins on each site are analyzed through numerical simulations, considering different initial states, in order to verify propensities caused by the geometry. In all the addressed cases, the occupations were mostly on the side that presented more sites. Then, lattices with different geometries, including symmetric and asymmetric cases, in contact with reservoirs described by the XX and the XXZ models, with dynamics governed by the Lindblad master equation were explored. For those, homogeneous and non-homogeneous external magnetic field are applied and also different configurations for the reservoirs are considered. Through numerical simulation, currents and rectification coefficient are calculated for each case and the occurrence of rectification were observed in all cases with geometrical asymmetry when a non-homogeneous magnetic field was applied.

Keywords: Rectification, closed quantum systems, open quantum systems, bidimensional spin lattice.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	13
2	CONCEITOS E ESTRUTURA MATEMÁTICA	17
2.1	Sistemas Quânticos Fechados	17
2.2	Sistemas Quânticos Abertos	19
2.2.1	Sistemas Quânticos compostos	19
2.2.2	Equação Mestra de Lindblad	20
2.2.3	Solução da equação de Lindblad	20
2.2.4	Os operadores de Lindblad como reservatórios de Spin	22
2.2.4.1	Equação de Lindblad discreta	22
2.2.4.2	Limite $\tau \rightarrow 0$	23
3	MODELOS, CORRENTE DE SPIN E RETIFICAÇÃO	27
3.1	Modelos	27
3.2	Correntes de Spin	28
3.3	Retificação	30
4	RETIFICAÇÃO DE CORRENTES DE SPIN EM REDES BIDIMENSIONAIS	33
4.1	Propagação de uma excitação em uma rede fechada	33
4.1.1	Geometrias abordadas	33
4.1.2	Estados iniciais	34
4.1.3	Resultados	35
4.2	Correntes de spin em uma rede bidimensional aberta	37
4.2.1	Abordagem	37
4.2.1.1	Notação	37
4.2.1.2	Estado Estacionário	37
4.2.1.3	Código	38
4.2.2	Geometria triangular com 10 sítios	40
4.2.2.1	Ausência de campo magnético e campo magnético homogêneo	40
4.2.2.2	Campo magnético não-homogêneo	41
4.2.3	Geometria com 8 sítios	44
4.2.3.1	Ausência de campo magnético e campo magnético homogêneo	45
4.2.3.2	Campo magnético não-homogêneo	45
4.2.4	Geometria retangular com 10 sítios	48
4.2.4.1	Ausência de campo magnético e campo magnético homogêneo	48

4.2.4.2	Campo magnético não-homogêneo	49
4.2.5	Geometria retangular com 9 sítios	51
4.2.5.1	Ausência de campo magnético e campo magnético homogêneo	51
4.2.5.2	Campo magnético não-homogêneo	52
4.2.6	Geometrias com 6 sítios	53
4.2.7	Reservatórios coletivos	54
4.3	Discussão dos resultados	55
5	CONCLUSÕES	57
	REFERÊNCIAS	59
	APÊNDICES	63
	APÊNDICE A – VETORIZAÇÃO	65
A.1	Definição	65
A.2	Vetorização da equação de Lindblad	65
	APÊNDICE B – CORRENTE PARA SÍTIOS FORA DAS EXTRE-	
	MIDADES	67
B.1	Redes unidimensionais	67
B.2	Redes bidimensionais sem campo magnético externo	67
B.3	Incluindo campo magnético externo	68

1 Introdução

A compreensão de fenômenos de transporte é importante tanto para a física fundamental quanto para aplicações tecnológicas de peso. Dentre eles destaca-se aqui a retificação, caracterizada pela magnitude da corrente em um sistema depender de seu sentido de propagação. Isto é, quando um sistema é colocado em contato com reservatórios que gerem uma corrente, e após um dado tempo esse sistema atingir um estado estacionário de não equilíbrio (situação em que o fluxo é constante entre os reservatórios), associa-se um valor $J(f)$ para essa corrente, como representado na Figura 1. Então, inverte-se esses reservatórios e, ao atingir o novo estado estacionário de não equilíbrio, associa-se um novo valor $J(-f)$, como representado na Figura 2. Se essas quantidades não possuem os mesmos valores em módulo, diz-se que esse sistema retifica.

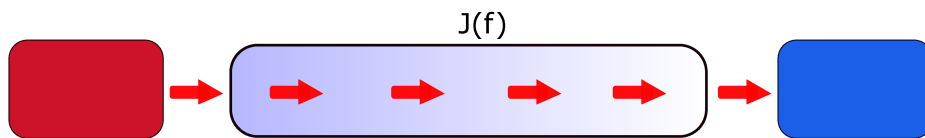


Figura 1 – Sistema com corrente $J(f)$ associada à primeira disposição dos reservatórios.

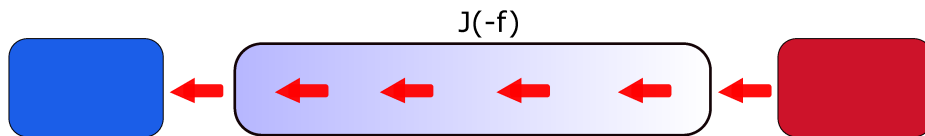


Figura 2 – Sistema com corrente $J(-f)$ associada à inversão da disposição dos reservatórios.

O caráter desses reservatórios pode variar de acordo com o sistema, podendo ser geradores de correntes térmicas ou elétricas, por exemplo. Sendo assim, a retificação é um fenômeno essencial para a construção de diodos [1–3].

Os *toy models* de sistemas quânticos de muitos corpos têm papel fundamental na área, pois permitem entender aspectos qualitativos de sistemas de muitos corpos como um todo, não raro descrevem acuradamente sistemas físicos, e, mais recentemente, podem ser arquitetados em uma variedade de plataformas experimentais [4–7]. Dentre esses modelos está o de Heisenberg e suas generalizações, como os modelos XYZ, XXZ, XY e XX, por exemplo. Através desses, e também de outros modelos, é possível representar cadeias de spin, calcular correntes de energia e magnetização presentes e explorar a ocorrência de retificação em sistemas quânticos [8–10]. Embora sejam mais comumente utilizados em casos unidimensionais, com as adaptações apropriadas eles ainda podem ser empregados na descrição de redes com mais dimensões.

Apesar da retificação já ser utilizada em dispositivos eletrônicos [11–13], como o diodo, ainda faltam informações sobre os requisitos necessários para sua ocorrência em sistemas quânticos. Diversos estudos em cadeias de spin foram realizados [8, 10, 14–16] e sabe-se que assimetrias no sistema são imprescindíveis para que o fenômeno seja observado. Porém, há casos de assimetrias que não são suficientes, como por exemplo no modelo XX unidimensional com interação entre primeiros vizinhos, onde a aplicação de um campo *graded*¹ ou interações do tipo *graded* não alteram a magnitude da corrente magnética (de spin), e portanto não há retificação. Ao contrário do que ocorre no modelo XXZ, em que esses perfis de configurações dos parâmetros do modelo são o bastante [8, 17].

Resultados abordando a condutividade térmica, aonde as correntes de energia que propagam pelo sistema são analisadas, também já foram obtidos. Em [9] foi observado em cadeias regidas pelo modelo XXZ unidimensional, com estrutura *graded*, a ocorrência de retificação de energia mesmo sob a aplicação de um campo magnético homogêneo. Já em [10] foi estudado o controle dessa corrente, constatando que a mudança de sinal da retificação possui dependência com o campo magnético, temperatura, parâmetro de anisotropia e também com o tamanho do sistema.

Entretanto, quando tratando-se de sistemas bidimensionais pouco se sabe sobre o comportamento das correntes, e por conta do grau de liberdade dimensional oferecido, é factível explorar diferentes geometrias e como elas podem afetar a dinâmica do sistema. Em [18], é proposto um modelo bidimensional para o gás de Lorentz com muitas partículas, explorando a retificação térmica induzida pela geometria. São calculadas as correntes de calor e coeficientes de retificação para sistemas trapezoidais, variando parâmetros referentes a geometria. Foi observada a ocorrência de maior retificação quanto mais assimétrico o sistema se apresentava, e também foi obtida uma relação universal para o coeficiente de retificação dependente apenas dos parâmetros geométricos e da temperatura dos reservatórios.

Esta dissertação tem como objetivo investigar como assimetrias geométricas em redes bidimensionais podem interferir no transporte de spins e se são capazes de induzir retificação de correntes magnéticas por conta dessa característica. São abordados os modelos XX e XXZ com e sem a aplicação de campos magnéticos externos e verifica-se que na presença de campos magnéticos não-homogêneos ambos os modelos apresentam a ocorrência de retificação quando uma assimetria geométrica é imposta.

O trabalho foi dividido da seguinte forma: No capítulo 2 são revisados alguns conceitos no contexto de sistemas quânticos abertos e fechados, assim como os formalismos matemáticos que serão utilizados. O capítulo 3 traz os modelos que serão empregados, a forma como é realizado o cálculo de correntes de magnetização para os casos uni e bidimensionais, e também são introduzidos conceitos e cálculos referentes a retificação,

¹ Configuração que varia gradualmente no espaço.

assim como casos em que esse fenômeno já foi observado na literatura. Por fim, no capítulo 4 são apresentados os resultados obtidos para os sistemas abertos e fechados, discutindo e comparando cada geometria e configuração abordada.

2 Conceitos e estrutura matemática

Neste capítulo é realizada uma revisão dos conceitos e formalismos matemáticos utilizados no decorrer do trabalho. Primeiramente são abordados no contexto de sistemas quânticos fechados o operador de evolução temporal, a equação de movimento e o cálculo de observáveis. Em seguida, discute-se sistemas quânticos abertos, sua dinâmica e solução da equação de movimento para estados estacionários de não-equilíbrio. Por fim, é feita a descrição dos reservatórios que serão especificamente considerados nessa dissertação.

2.1 Sistemas Quânticos Fechados

Na mecânica quântica, um estado físico pode ser representado por um vetor de estado pertencente a um espaço vetorial complexo, dotado de produto interno, completo e separável, chamado espaço de Hilbert \mathcal{H} . É postulado que esse vetor, também chamado de *ket* e representado por $|\psi\rangle$, possui toda a informação sobre o sistema físico, e é por isso denominado estado do sistema. [19].

Em um sistema quântico fechado a dinâmica do estado é dada pela equação de Schrödinger:

$$H(t) |\psi(t)\rangle = i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle , \quad (2.1)$$

onde $H(t)$ é a Hamiltoniana do sistema e a constante de Planck \hbar foi definida igual a 1. A solução da equação pode ser representada em termos do operador unitário de evolução temporal $\mathcal{U}(t, t_0)$, que transforma o estado $|\psi(t_0)\rangle$, em um dado instante t_0 inicial no estado $|\psi(t)\rangle$ no instante t . Ou seja,

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle . \quad (2.2)$$

Para um sistema isolado, com Hamiltoniana independente do tempo, o operador de evolução temporal possui a forma:

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp [-i(t - t_0)H]. \quad (2.3)$$

Sabendo-se o vetor $|\psi(t)\rangle$, é possível obter o valor médio de um observável associado a um operador hermitiano A a partir da relação:

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle . \quad (2.4)$$

Esse formalismo trata sistemas em que todos os membros de um *ensemble* (coleção de sistemas físicos identicamente preparados) são caracterizados por um mesmo *ket* de

estado, e são chamados *ensembles* puros. Porém, em muitos casos não é possível ter acesso a toda a informação do sistema para descrevê-lo dessa forma, visto que pode estar sujeito a incertezas tanto de caráter clássico como na preparação do estado [20]. Torna-se então necessário um formalismo que inclua esse caráter probabilístico.

Em 1927, John von Neumann introduziu o formalismo da matriz densidade, ou operador densidade, com o qual é possível descrever tanto *ensembles* puros quanto mistos (não puros). Esse operador pode ser definido como:

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| . \quad (2.5)$$

onde p_i representa a probabilidade do sistema encontrar no estado $|\psi_i\rangle$, $0 < p_i < 1$ e $\sum_i p_i = 1$. Ele possui as seguintes propriedades:

- Normalizado: $\text{Tr}(\rho) = 1$,
- Hermitiano: $\rho = \rho^\dagger$,
- Definido positivo: $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0, \forall |\psi\rangle$.

A evolução temporal do operador densidade $\rho(t_0)$ é dada pela evolução temporal dos vetores de estado $|\psi_i(t_0)\rangle$, regidas pela equação de Schrödinger. O estado do sistema no instante t será portanto:

$$\rho(t) = \sum_i p_i \mathcal{U}(t, t_0) |\psi_i(t_0)\rangle \langle \psi_i(t_0)| \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) , \quad (2.6)$$

podendo ser escrito como:

$$\rho(t) = \mathcal{U}(t, t_0) \rho(t_0) \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) . \quad (2.7)$$

Diferenciando a equação (2.7) em relação ao tempo e utilizando a equação de Schrödinger (2.1), obtemos a equação de movimento da matriz densidade:

$$\frac{d}{dt} \rho = -i[H, \rho] , \quad (2.8)$$

conhecida como equação de Liouville-von Neumann [21].

Como $|\psi_i(t)\rangle$ pertence ao espaço de Hilbert \mathcal{H} , podemos utilizar a relação de completudeza $\sum_j |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j| = \mathbb{1}$ e novamente obter o valor médio de um observável associado ao operador hermitiano A :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &= \sum_i \langle \psi_i(t) | A | \psi_i(t) \rangle \\ &= \sum_i \sum_j \sum_k p_i \langle \psi_i(t) | \alpha_j \rangle \langle \alpha_j | A | \alpha_k \rangle \langle \alpha_k | \psi_i(t) \rangle \\ &= \text{Tr}[A\rho(t)] \end{aligned} \quad (2.9)$$

e como o traço é uma operação que independe da representação, o valor médio pode ser calculado em qualquer base.

2.2 Sistemas Quânticos Abertos

2.2.1 Sistemas Quânticos compostos

Um sistema quântico aberto é, de forma geral, um conjunto de sistemas acoplados entre si. Para descrevê-lo como um todo é necessário utilizar a abordagem de sistemas compostos.

Quando um conjunto de sistemas quânticos $(S^{(1)}, S^{(2)}, \dots, S^{(N)})$ com seus respectivos espaços de Hilbert $(\mathcal{H}^{(1)}, \mathcal{H}^{(2)}, \dots, \mathcal{H}^{(N)})$ são considerados em conjunto, o espaço de estados total \mathcal{H} da combinação dos sistemas $S = \sum_j^N S^{(j)}$ é dado pelo produto tensorial entre os espaços dos subsistemas:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}^{(N)}. \quad (2.10)$$

E os vetores de \mathcal{H} são combinações lineares dos vetores da forma produto:

$$|\Psi\rangle = \bigotimes_{j=1}^N |\psi_j\rangle. \quad (2.11)$$

Dado um operador $O^{(j)}$ atuando no j -ésimo espaço, define-se um operador correspondente atuando no espaço inteiro, tomando-se o produto tensorial com operadores densidade atuando nos espaços restantes:

$$\mathcal{O}_j = \mathbb{1}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} \otimes \dots \otimes O^{(j)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}^{(N-1)} \otimes \mathbb{1}^{(N)}. \quad (2.12)$$

Assim, se $O^{(j)}$ descreve a energia interna do j -ésimo sistema quando considerado sozinho, \mathcal{O}_j descreve essa mesma energia interna quando o sistema é considerado em conjunto com os demais.

Um sistema quântico S , associado a um espaço de Hilbert \mathcal{H}^s , interagindo com o ambiente A com espaço associado \mathcal{H}^a pode ser visto como um sistema composto em que o sistema quântico está acoplado ao ambiente, representado na Figura 3.

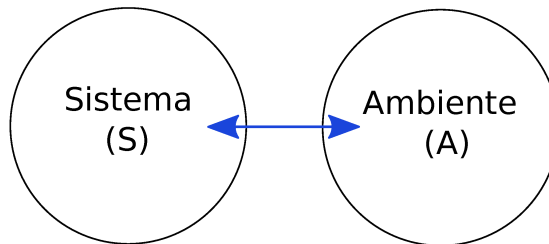


Figura 3 – Representação esquemática do sistema em contato com o ambiente, ou reservatório.

A descrição total de um sistema composto pode vir a ser inviável quando o ambiente é um reservatório com infinitos graus de liberdade [21]. Então, para esses casos, é possível,

em algumas circunstâncias, descrever a dinâmica do sistema S utilizando a abordagem de equações mestras.

2.2.2 Equação Mestra de Lindblad

Diferentemente do que ocorre para um sistema fechado, a dinâmica de um sistema aberto nem sempre pode ser dada apenas por operadores unitários. Por conta disso e da dificuldade em descrever reservatórios, muitas vezes faz-se vantajoso utilizar o formalismo de equações mestras, capazes de caracterizar a dinâmica do sistema sem que haja a necessidade de fazer uma descrição total do ambiente (ou reservatório) com o qual ocorre o acoplamento.

As equações mestras descrevem a dinâmica do estado de um sistema aberto, que é, tipicamente, um operador densidade. Portanto, a escolha de uma equação que caracterize essa dinâmica de forma apropriada é essencial. No contexto de sistemas quânticos abertos, é necessário que essa dinâmica resulte em estados quânticos e por conta disso a equação mestra de Lindblad é vastamente utilizada [21]. Sua forma diagonal é dada por:

$$\mathcal{L}(\rho) = \frac{d}{dt}\rho = -i[H, \rho] + \sum_{j=1}^{N^2-1} \gamma_j (L_j \rho L_j^\dagger - \frac{1}{2} \{L_j^\dagger L_j, \rho\}), \quad (2.13)$$

onde N é a dimensão da matriz densidade, γ_j são constantes positivas e L_j são comumente chamados de operadores de Lindblad, utilizados para descrever como ocorre a interação entre o sistema e o ambiente. Essa equação é restrita à sistemas Markovianos, ou seja, o estado do sistema em um dado instante de tempo t pode ser obtido a partir de qualquer estado em um tempo $t' < t$, não sendo necessário o conhecimento da sequência de estados precedentes.

A demonstração matemática da equação (2.13) foi feita por Gorini, Kossakowski e Sudarshan em 1976 [22], na mesma época em que Lindblad (1976) provou em um teorema que essa equação fornece a forma mais geral de um gerador de uma dinâmica Markoviana [23].

2.2.3 Solução da equação de Lindblad

É de interesse nesse trabalho obter o estado estacionário de não-equilíbrio (NESS¹), que satisfaz $\mathcal{L}(\rho) = 0$. Essa solução pode ser obtida quando o sistema em questão for relaxante, ou seja, quando a dinâmica possui um único estado assintótico.

Para encontrar o NESS foi utilizado o método de vetorização, o qual consiste em escrever matrizes em forma de vetores, sendo a operação que realiza essa transformação

¹ Do inglês *non-equilibrium steady state*

denotada por $\text{vec}(\cdot)$. Para matrizes 2×2 essa operação² é dada por:

$$\text{vec} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ c \\ b \\ d \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

e para quaisquer matrizes A , B e C verifica-se a identidade:

$$\text{vec}(ABC) = (C^\top \otimes A)\text{vec}(B). \quad (2.15)$$

Para simplificar a notação, denota-se a vetorização da matriz densidade como:

$$\text{vec}(\rho) = |\rho\rangle. \quad (2.16)$$

Utilizando as propriedades de vetorização na equação de Linblad é possível obter (através do desenvolvimento no Apêndice A.2) a forma vetorizada da equação:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\rho\rangle &= [-i((\mathbf{1} \otimes H) - (H^\top \otimes \mathbf{1})) \\ &+ \sum_j (L_j^* \otimes L_j) - \frac{1}{2}(\mathbf{1} \otimes L_j^\dagger L_j + (L_j^\dagger L_j)^\top \otimes \mathbf{1})] |\rho\rangle, \end{aligned} \quad (2.17)$$

podendo-se escrever de forma mais intuitiva e compacta:

$$|\dot{\rho}\rangle = W |\rho\rangle. \quad (2.18)$$

Para W independente do tempo, a solução dessa equação pode ser escrita como:

$$|\rho(t)\rangle = e^{Wt} |\rho(0)\rangle. \quad (2.19)$$

Como o sistema que será abordado nessa dissertação possui a propriedade de ser relaxante, o NESS é atingido em um tempo suficientemente grande. Dessa forma esse estado é obtido quando $t \rightarrow \infty$:

$$\frac{d}{dt} |\rho(t \rightarrow \infty)\rangle = \frac{d}{dt} |\rho_{ss}\rangle = 0 \quad (2.20)$$

e portanto,

$$|\rho_{ss}\rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} e^{Wt} |\rho(0)\rangle. \quad (2.21)$$

² Uma definição mais geral dessa operação encontra-se no Apêndice A.1.

2.2.4 Os operadores de Lindblad como reservatórios de Spin

2.2.4.1 Equação de Lindblad discreta

Nesse trabalho são abordadas redes de spin descritas pelo modelo XXZ (que será discutido em mais detalhes no capítulo 3), em contato com reservatórios de spin. Os operadores que descrevem esses reservatórios são dados por:

$$L_{\pm} = \sqrt{(1 \pm f)} \sigma^{\pm}, \quad (2.22)$$

em que $\sigma^{\pm} = \frac{\sigma^x \pm i\sigma^y}{2}$ são os operadores de Pauli atuando em sítios da rede.

A forma dos operadores L_{\pm} pode ser obtida através do método de interações repetidas [8,17]. Para isso, assume-se uma cadeia de N spins unidimensional com interações apenas entre primeiros vizinhos. Então, adicionam-se mais dois spins 0 e $N + 1$, acoplados aos sítios 1 e N , respectivamente. A nova Hamiltoniana total agora é dada por:

$$H_T = H + V_0 + V_N, \quad (2.23)$$

onde $V_i = \alpha(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y)$ descreve a interação entre os sítios 0 e 1, e N e $N + 1$.

Para o tempo $t = 0$, assume-se que o sistema está desacoplado dos sítios adicionais e então a matriz densidade total ρ_T pode ser fatorada na forma:

$$\rho_T = \rho_E \otimes \rho(0) \otimes \rho_D, \quad (2.24)$$

onde ρ_E e ρ_D são as matrizes densidade dos spins 0 e $N + 1$, respectivamente. Também assume-se que em $t = 0$ os spins adicionais estão em equilíbrio térmico, então:

$$\rho_E = \frac{(1 + f_E)}{2} |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + \frac{(1 - f_E)}{2} |\downarrow\rangle \langle \downarrow|,$$

onde $f_E = \langle \sigma_0^z \rangle$, e

$$\rho_D = \frac{(1 + f_D)}{2} |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + \frac{(1 - f_D)}{2} |\downarrow\rangle \langle \downarrow|,$$

para $f_D = \langle \sigma_{N+1}^z \rangle$.

A dinâmica desse sistema aumentando é dado pela equação de Von-Neumann:

$$\frac{d}{dt} \rho_T = -i[H_T, \rho_T],$$

tendo como solução:

$$\rho_T(t) = \mathcal{U}(t) \rho_T(0) \mathcal{U}^\dagger(t)$$

sendo $\mathcal{U}(t) = e^{-iH_T t}$.

Para o esquema de interações repetidas, começa-se em $t = 0$ com $\rho_T(0)$ fatorado como em (2.24), e permite-se que o sistema evolua até um tempo $t = \tau$, de forma que:

$$\rho_T(\tau) = \mathcal{U}(\tau)(\rho_E \otimes \rho(0) \otimes \rho_D)\mathcal{U}^\dagger(\tau). \quad (2.25)$$

Então, descartam-se os spins 0 e $N + 1$ através do traço parcial:

$$\rho(\tau) = \text{Tr}_{(E,D)}(\rho_T(\tau)).$$

Em seguida tomam-se novos spins dos reservatórios e constrói-se o novo estado:

$$\rho_T(\tau) = \rho_E \otimes \rho(\tau) \otimes \rho_D.$$

O processo é repetido indefinidamente. Definindo $\rho_n = \rho(n\tau)$, o procedimento pode ser resumido pela expressão:

$$\rho_{n+1} = \text{Tr}_{(E,D)}(\mathcal{U}(\tau)(\rho_E \otimes \rho_n \otimes \rho_D)\mathcal{U}^\dagger(\tau)). \quad (2.26)$$

Sendo essa uma versão discreta da equação de Lindblad.

2.2.4.2 Limite $\tau \rightarrow 0$

Para obter os operadores na forma (2.22) é necessário realizar o limite em que $\tau \rightarrow 0$. Com esse objetivo, utiliza-se a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff:

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

então insere-se esse na equação (2.26) e realiza-se os traços parciais. Para o primeiro termo tem-se:

$$\text{Tr}_{(E,D)}(\rho_E \otimes \rho_n \otimes \rho_D) = \rho_n,$$

para o segundo termo verifica-se que:

$$\text{Tr}_{(E,D)}([H_T, \rho_T]) = [H, \rho_n]$$

e o terceiro termo é dado por:

$$\text{Tr}_{(E,D)}([H_T, [H_T, \rho_T]]) = \text{Tr}_{(E,D)}([V_0, [V_0, \rho_T]]) + \text{Tr}_{(E,D)}([V_N, [V_N, \rho_T]]).$$

Pode-se observar que para a primeira ordem de τ o acoplamento torna-se negligenciável, então para que seja possível obter uma contribuição finita é preciso que V_i dependa do tempo de interação τ , tal que:

$$V_i = \sqrt{\frac{\gamma}{\tau}}(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) \quad (2.27)$$

em que γ é uma nova constante. Com isso, define-se:

$$\begin{aligned} -\frac{\tau^2}{2}[V_0, [V_0, \rho_T]] &:= \tau D_E(\rho_n), \\ -\frac{\tau^2}{2}[V_N, [V_N, \rho_T]] &:= \tau D_D(\rho_n). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Assim sendo, a equação (2.26) resulta em:

$$\rho_{n+1} = \rho_n - i\tau[H, \rho_n] + \tau(D_E(\rho_n) + D_D(\rho_n)). \quad (2.29)$$

Dividindo a equação por τ e tomando-se o limite $\tau \rightarrow 0$ obtém-se:

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

Utilizando a equação (2.27) pode-se obter:

$$D_{(E,D)}(\rho) = \sum_{s=\pm} L_s^{(E,D)} \rho L_s^{(E,D)\dagger} - \frac{1}{2} \{L_s^{(E,D)} L_s^{(E,D)\dagger}, \rho\},$$

com:

$$L_{\pm}^{(E,D)} = \sqrt{\frac{\gamma}{2}(1 \pm f^{(E,D)})} \sigma_{1,N}^{\pm}.$$

Fazendo uma alteração de escala $\frac{\gamma}{2} \rightarrow \gamma$ chega-se na expressão (2.13) com L_{\pm} dado por (2.22).

Quanto mais próximo f está de ± 1 , mais intensamente o reservatório estará forçando a orientação do spin em um sentido. Se $f = 1$, o reservatório fará com que o spin no sítio fique no estado *up*, enquanto para $f = -1$, o reservatório fará com que o spin fique no estado *down*. Para outros valores de f haverá uma “competição” entre dois reservatórios atuando em um mesmo sítio, tal que para $f = 0$, resultará uma combinação de estados *up* e *down* com mesmas probabilidades nesse sítio. Por exemplo, considerando um único sítio, dado pela matriz densidade:

$$\rho = \begin{pmatrix} p & c \\ c^* & (1-p) \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

em contato com um único reservatório de magnetização, representado pelos operadores:

$$L_+ = \sqrt{1+f} \sigma^+ \quad \text{e} \quad L_- = \sqrt{1-f} \sigma^-, \quad (2.31)$$

terá como equação de movimento:

$$\frac{d}{dt}\rho = \gamma \begin{pmatrix} 1+f-2p & -c \\ -c^* & 2p-1-f \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Para o NESS, caso em que $\frac{d}{dt}\rho = 0$ é satisfeito, resultará em um sistema de equações:

$$\begin{aligned} p &= \frac{1+f}{2}, \\ c &= 0. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Dessa maneira, quando $f = 1$ a matriz densidade no estado estacionário será dada por:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

caracterizando o estado como spin *up*. Já para $f = -1$ ela será dada por

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.35)$$

caracterizando o estado como spin *down* e resultará em

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

quando $f = 0$, que é combinação dos dois estados com mesmas probabilidades.

3 Modelos, corrente de spin e retificação

Neste capítulo apresenta-se inicialmente os modelos que serão utilizados para descrever uma rede de spins e como são calculadas as correntes de magnetização para sistemas unidimensionais. Em seguida, é feita uma generalização para o caso bidimensional em que o número de interações pode ser diferente para cada sítio. Por fim, é definido o que se entende por retificação, o cálculo do seu coeficiente e discute-se alguns resultados da literatura.

3.1 Modelos

Modelos integráveis têm um papel muito importante no entendimento de sistemas quânticos de muitos corpos devido às suas soluções exatas [24–27], sendo possível também abordá-los através de métodos numéricos e analíticos poderosos. Além disso, avanços recentes em experimentos com átomos frios, íons armadilhados e átomos de Rydberg permitem que esses modelos sejam reproduzidos em laboratório [4–7].

O modelo de Hubbard é um dos mais importantes na física teórica. A partir dele é possível descrever férmions interagindo em uma rede, possuindo um termo cinético que permite o tunelamento (*hopping*) das partículas entre os sítios e também um termo potencial de interação no sítio (*on-site*). Acredita-se que ele seja capaz de exibir diversos fenômenos físicos como a transição metal-isolante, antiferromagnetismo, ferrimagnetismo, ferromagnetismo, líquido de Tomonaga-Luttinger e também a supercondutividade. Porém, a compreensão das diversas propriedades desse modelo é considerada uma tarefa muito difícil e por isso torna-se interessante explorar seus casos limites [28].

Um sistema em que os elétrons interagem fortemente é um dos limites que pode ser considerado, e a partir dele pode-se obter o modelo XYZ. Esse teve sua primeira solução exata obtida por Baxter, em 1971 [29] para o caso unidimensional. Comumente ele é descrito pela Hamiltoniana na forma:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} (\alpha_x \sigma_i^x \sigma_j^x + \alpha_y \sigma_i^y \sigma_j^y + \Delta \sigma_i^z \sigma_j^z), \quad (3.1)$$

onde σ_k^a com $a \in x, y, z$ são as matrizes de Pauli atuando no k -ésimo sítio, os índices i e j se referem a sítios que interagem entre si, tipicamente, primeiros vizinhos de uma rede, e α_x , α_y e Δ são os parâmetros de acoplamento.

A escolha dos parâmetros pode separar esse modelo em diversos casos. Nesse trabalho são considerados o modelo XXZ, caracterizado por $\alpha_x = \alpha_y$ e $\Delta \neq 0$ e também o

XY, dado por $\alpha_x \neq \alpha_y$ e $\Delta = 0$. Quando $\alpha_x = \alpha_y (= \alpha)$ e $\Delta = 0$ o modelo XY torna-se isotrópico e é também chamado de XX. Para o modelo unidimensional com interação entre primeiros vizinhos, essa propriedade é interessante, pois ao transformar os operadores de spin em fermiônicos restam apenas termos cinéticos, o que caracteriza a dinâmica de partículas não interagentes. O modelo XX pode ser reescrito apenas em termos dos operadores σ_k^+ e σ_k^- :

$$H = 2\alpha \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^+ \sigma_j^- + \sigma_i^- \sigma_j^+), \quad (3.2)$$

sendo interpretado mais facilmente como a propagação de spins através da rede.

Além desses modelos preservarem a magnetização total, também é factível a inclusão de outras interações, como por exemplo a aplicação de um campo magnético externo atuando separadamente em cada sítio. Essa interação pode ser descrita pelo operador:

$$V = \sum_i h_i \sigma_i^a, \quad (3.3)$$

onde índice i é referente ao sítio em que o campo h_i é aplicado na direção a ($a \in x, y, z$).

3.2 Correntes de Spin

Uma das propriedades fundamentais das correntes elétricas é que elas obedecem uma equação de continuidade, devido à conservação de carga:

$$\dot{\rho}_c = -\nabla \cdot \mathbf{j}_c, \quad (3.4)$$

onde ρ_c é a densidade de cargas e \mathbf{j}_c a densidade de corrente de cargas. Ao tratar-se de correntes de spin, uma densidade de corrente de spin \mathbf{j}_s é introduzida e é abordada de forma similar a partir da conservação do momento angular. Se o momento angular total for conservado, a equação de continuidade pode ser escrita por:

$$\frac{d}{dt} M = -\nabla \cdot \mathbf{j}_s, \quad (3.5)$$

onde M é a magnetização local (densidade de momento magnético) em uma direção fixada. Também podem ocorrer casos em que o momento angular total não é conservado, de forma que a equação de continuidade é dada por:

$$\frac{d}{dt} M = -\nabla \cdot \mathbf{j}_s + T, \quad (3.6)$$

em que T representa o termo de não conservação, ou seja, um gerador ou sumidouro de momento angular [30].

A corrente para spins *up* (ou *down*), autoestados de σ^z , para o modelo XXZ unidimensional, com interações $\alpha_x = \alpha_y = \alpha$ apenas entre primeiros vizinhos, possui a forma conhecida [8]:

$$J_k = 2\alpha \langle \sigma_k^x \sigma_{k+1}^y - \sigma_k^y \sigma_{k+1}^x \rangle, \quad (3.7)$$

referente a corrente entre os sítios k e $k + 1$. Essa é obtida através do cálculo da variação temporal da magnetização local, ou seja, a variação do valor esperado da ocupação no sítio k :

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle = J_{k-1} - J_k, \quad (3.8)$$

para sítios k que não estão em contato com reservatórios (desenvolvimento no Apêndice B.1).

Utilizando uma formulação análoga, é possível tratar um sistema bidimensional onde o número de interações não é necessariamente a mesma em cada sítio. Sendo o sistema descrito pelo modelo XY, calcula-se:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle = \frac{d}{dt} (\text{Tr}(\sigma_k^z \rho)) = \text{Tr} \left(\frac{d\rho}{dt} \sigma_k^z \right)$$

e fazendo uso da equação de Lindblad:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle = \text{Tr}(-i[H, \rho] \sigma_k^z + D(\rho) \sigma_k^z). \quad (3.9)$$

Com isso, quando k não pertence às extremidades, obtém-se (através do desenvolvimento do Apêndice B.2):

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle = 2 \sum_j \langle \alpha_x \sigma_k^y \sigma_j^x - \alpha_y \sigma_k^x \sigma_j^y \rangle, \quad (3.10)$$

no qual a soma em j se refere a sítios que estão em contato com o sítio k . E quando tratando-se do modelo isotrópico ($\alpha_x = \alpha_y = \alpha$), tem-se a equação de continuidade:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle = 2\alpha \sum_j \langle \sigma_k^y \sigma_j^x - \sigma_k^x \sigma_j^y \rangle. \quad (3.11)$$

Dessa forma podemos concluir que a variação temporal do valor esperado da ocupação no sítio é a soma das correntes entre os sítios que interagem entre si. Mesmo com uma ligeira diferença entre o caso unidimensional, a corrente de spin ainda pode ser descrita da mesma maneira.

Para o modelo XXZ o cálculo das correntes não se altera, visto que os termos que se diferem do modelo XX comutam com σ_k^z . Já para situações em que campos magnéticos são incluídos podem aparecer termos adicionais no cálculo do valor esperado

da ocupação, dependendo de qual for sua direção. Para sítios que não estão em contato com reservatórios e um campo magnético na direção $a (= x, y \text{ ou } z)$ é aplicado, obtém-se (através do desenvolvimento feito no Apêndice B.3):

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle = 2\alpha \sum_j \langle \sigma_k^y \sigma_j^x - \sigma_k^x \sigma_j^y \rangle - 2h_k \varepsilon_{abz} \langle \sigma_k^b \rangle, \quad (3.12)$$

onde ε_{abz} é símbolo de Levi-Civita. Ou seja, ao aplicar um campo magnético externo na direção $a \neq z$ o termo de não conservação de momento angular aparece, consistente com a equação de continuidade (3.6).

3.3 Retificação

Retificação é um fenômeno de transporte caracterizado pela corrente em um sistema possuir dependência com o sentido de propagação. Um exemplo de interesse é a retificação térmica, observada pela primeira vez por Starr, em 1936, através de um experimento com óxido de cobre [31]. Outro caso, mais recente e de grande importância é o diodo elétrico, componente retificador do transistor, elemento fundamental para o funcionamento de dispositivos eletrônicos.

Em cadeias de spin colocadas em contato com reservatórios de magnetização, um fluxo associado a correntes de spin aparece. Se invertermos esses reservatórios, espera-se que esse fluxo também seja invertido, e caso sua magnitude não seja a mesma, dizemos que esse sistema possui retificação. Matematicamente, essa inversão pode ser descrita apenas trocando o sinal de f do operador (2.22) [32]. Dessa forma podemos dizer que se um sistema retifica, então a corrente $J(-f) \neq -J(f)$, onde o sinal de J caracteriza o sentido no qual a corrente se propaga. Com isso pode-se definir um coeficiente de retificação:

$$R = \frac{J(f) + J(-f)}{J(f) - J(-f)}, \quad (3.13)$$

no qual os casos extremos em que $R = \pm 1$ o sistema retifica totalmente e quando $R = 0$ não ocorre retificação alguma. Há uma exceção em que o valor absoluto de R pode ser maior que 1 e até mesmo divergir, que ocorre quando se observa o efeito de *one-way street* (na ausência de campos magnéticos externos, a inversão da magnetização nos reservatórios acoplados à rede não altera o sentido da corrente). Esse é investigado em [33] para correntes de energia no modelo XXZ, com uma distribuição do tipo *graded* para parâmetro de anisotropia Δ e também o modelo de Heisenberg (XXX) em que estende-se esse tipo de configuração para os parâmetros α_x e α_y .

Resultados abordando a retificação de correntes de spin em sistemas quânticos também já foram obtidos. Por exemplo, em [8] é analisado o modelo XXZ unidimensional (Eq. 3.1 com $\alpha_x = \alpha_y$) com interação entre primeiros vizinhos, apresentando a existência de retificação numa cadeia com $N = 3$ sítios em que o campo magnético externo $h^z \neq 0$ (Eq.

3.3) (nesse caso o campo é um gradiente linear que varia de $-h$ até h ao longo da cadeia), para diferentes valores de Δ ($\neq 0$) e de f ($= 0, 0.5$ e 1). Nesse mesmo trabalho também é mostrado que quando $\Delta = 0$ (modelo XX) a retificação não ocorre, ainda quando na presença de um campo magnético externo gradiente.

Outro exemplo é em [14], o qual expõe a possibilidade de retificação em cadeias de spin XXZ unidimensionais segmentadas, apresentando resultados para cadeias com maior quantidade de sítios ($N = 4, 6, 8$ e 10) e tendo como ingrediente chave maiores valores do parâmetro de anisotropia em metade do sistema e com retificação máxima quando uma das metades da cadeia é descrita pelo modelo XX.

Dessa maneira, sabe-se que para que ocorra a retificação o sistema deve apresentar alguma forma de não-homogeneidade, porém quando acrescentado um grau de liberdade dimensional não se sabe como a imposição de uma assimetria geométrica possa fazer esse papel. Por conta disso, neste trabalho busca-se estudar como a geometria de uma rede interfere no processo de transporte de spins e se ela é uma possível responsável por induzir retificação de correntes magnéticas.

4 Retificação de correntes de spin em redes bidimensionais

Neste capítulo primeiramente são analisados sistemas fechados com assimetria geométrica, apresentando resultados a respeito do comportamento das ocupações em redes com 6 e 10 sítios para três estados iniciais distintos. Em seguida discute-se a abordagem utilizada ao incluir reservatórios em sistemas bidimensionais e são apresentados resultados acerca da retificação em redes com diferentes geometrias, regidas pelos modelos XX e XXZ, incluindo casos com campos magnéticos homogêneos e não-homogêneos.

4.1 Propagação de uma excitação em uma rede fechada

No intuito de estudar a dinâmica em sistemas com assimetria geométrica foram realizadas simulações do modelo XX para duas geometrias triangulares em que não há acoplamento com reservatórios. A evolução temporal nesse caso é dada por um operador unitário e não há a necessidade de utilizar o formalismo de matriz densidade.

4.1.1 Geometrias abordadas

Duas redes triangulares foram utilizadas para análise do sistema fechado, uma com 6 e outra com 10 sítios. Foi estabelecida uma enumeração para os sítios de forma que aumente da esquerda para a direita e de cima para baixo, como representado nas figuras 4a e 4b.

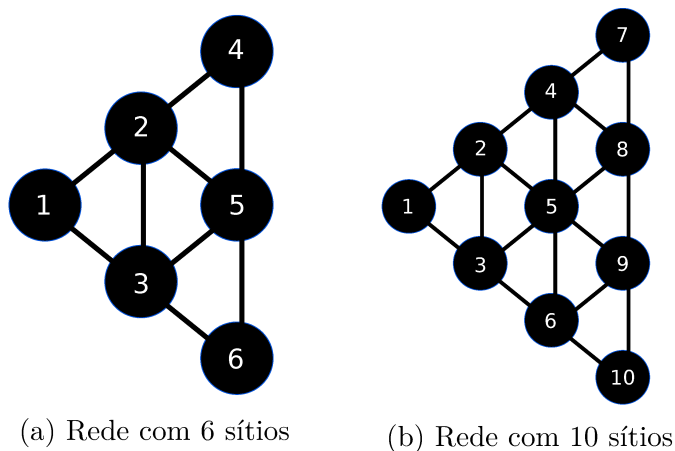


Figura 4 – Redes utilizadas na simulação de sistemas fechados. A enumeração feita da esquerda para a direita e de cima para baixo para fins computacionais e facilitar a notação.

Essa geometria foi escolhida pois possui um número maior de sítios de um lado em comparação com o outro, fornecendo uma assimetria para o sistema.

4.1.2 Estados iniciais

O estado total do sistema $|\psi(t)\rangle$ é dado pelo produto entre cada estado dos N sítios. Foram escolhidos três estados iniciais distintos em que cada sítio k está em um autoestado (*up* $|\uparrow\rangle_k$ ou *down* $|\downarrow\rangle_k$) de σ_k^z . Foi estabelecido analisar o comportamento dos spins *up* e portanto os estados iniciais foram escolhidos de forma que para todos eles a ocupação total desses spins fosse a mesma. Os casos foram separados da seguinte maneira:

- Caso 1: Um spin *up* no sítio 1 e o restante com spins *down*:

$$|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle_1 \prod_{i=2}^N |\downarrow\rangle_i. \quad (4.1)$$

- Caso 2: Spins *up* nos sítios da direita e o restante com spins *down*:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=N-n+1}^N |\uparrow\rangle_k \prod_{j \neq k} |\downarrow\rangle_j, \quad (4.2)$$

onde n é a quantidade de sítios pertencentes às extremidades da direita. Essa situação é uma superposição de possíveis estados em que o spin *up* está em um dos sítios da direita.

- Caso 3: Spins *up* com fases alternadas nos sítios da direita e o restante com spins *down*:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=N-n+1}^N (-1)^k |\uparrow\rangle_k \prod_{j \neq k} |\downarrow\rangle_j. \quad (4.3)$$

Esse estado inicial consiste em inserir uma fase alternadamente nos possíveis estados em que o spin *up* está em um sítio da extremidade direita da rede. Isso é feito na intenção de verificar efeitos de interferência na propagação ao longo da cadeia.

Uma representação esquemática para 6 sítios é dada nas figuras (5a, 5b e 5c), sendo análogo para 10 sítios.

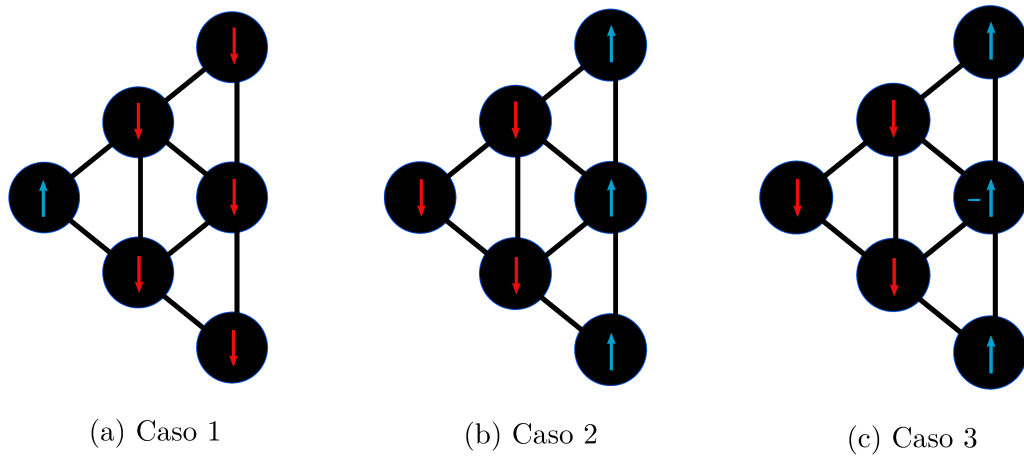


Figura 5 – Representação dos três casos de estados iniciais para uma rede de 6 sítios

4.1.3 Resultados

Com esses estados iniciais foram analisadas as dinâmicas de sistemas com 6 e 10 sítios para a cadeia do tipo XX (3.2) com parâmetro de interação $\alpha = 1.0$. Em sistemas fechados não é coerente avaliar o comportamento da corrente, visto que a ocupação oscila entre os sítios mudando seu sentido e o NESS não é atingido. Por conta disso foi analisada a ocupação média em cada sítio e a soma das ocupações médias nos sítios da direita. A soma é levada em consideração pois há o interesse em saber se o sistema possui um lado que “prefere” ser ocupado. Para a realização dessas simulações e geração dos gráficos foi utilizado o *software* MATLAB[®] [34].

Nos resultados para 6 sítios, representados nos gráficos (6a, 6b e 6c), é observado que os estados iniciais 1 e 2 resultaram em ocupações médias muito parecidas, tendo diferenças mais visíveis nos sítios 2 e 3. Já para o caso 3 observa-se uma maior distinção entre as ocupações, sendo evidente a ocorrência de maiores ocupações nos sítios da direita.

Para o sistema com 10 sítios, representados nos gráficos (7a, 7b e 7c), observam-se resultados mais distintos. No caso 1 verifica-se que as ocupações ficam mais homogêneas distribuídas entre os sítios, diferentemente do caso 2 em que é observado uma menor ocupação nos sítios 4 e 6. Nota-se um grande contraste para o caso 3, em que não foram observadas ocupações nos sítios 1 e 5, decorrentes de uma interferência destrutiva, e também uma maior concentração nos sítios da direita em comparação com os outros casos.

Em ambas as geometrias foram observadas maiores ocupações do lado direito, sendo mais evidente para 10 sítios. Esse possui um caso mais marcante ao incluir as fases alternadas, sendo observado interferências destrutivas ao longo da rede fazendo com que os sítios 1 e 5 não sejam ocupados.

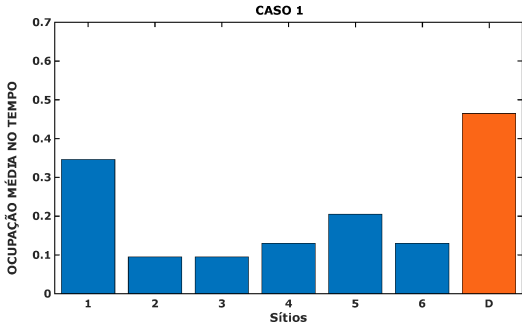
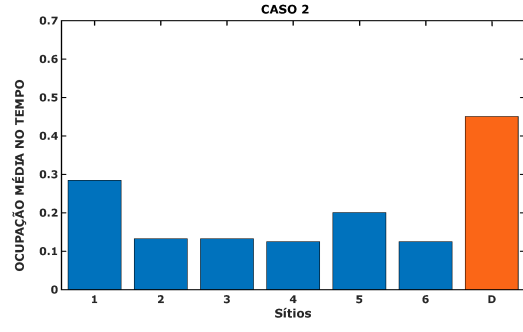
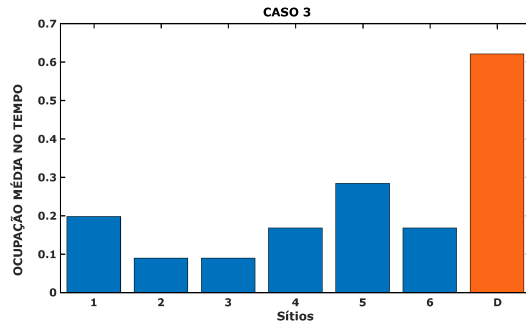
(a) Caso 1: $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle_1 \prod_{i=2}^6 |\downarrow\rangle_i$ (b) Caso 2: $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{k=4}^6 |\uparrow\rangle_k \prod_{j \neq k} |\downarrow\rangle_j$ (c) Caso 3: $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{k=4}^6 (-1)^k |\uparrow\rangle_k \prod_{j \neq k} |\downarrow\rangle_j$

Figura 6 – As colunas de 1 à 6 se referem a ocupação média em cada sítio e a coluna (D) é a soma das ocupações médias dos sítios da direita (4, 5 e 6).

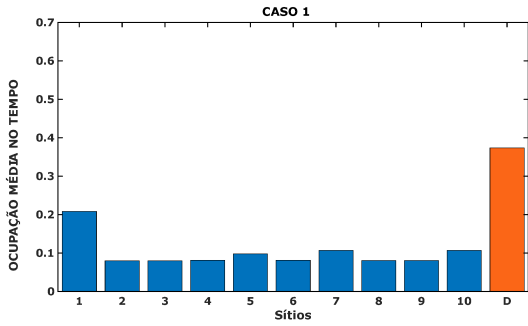
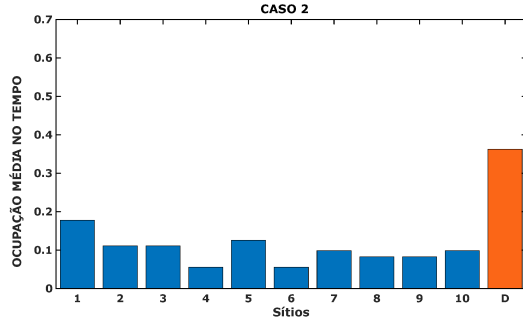
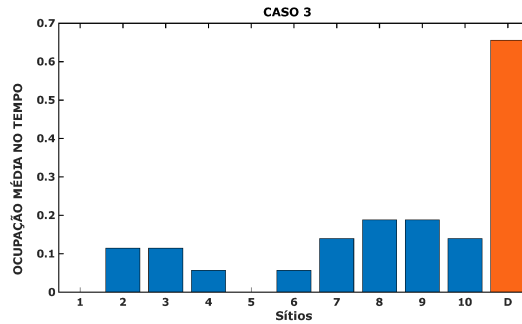
(a) Caso 1: $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle_1 \prod_{i=2}^{10} |\downarrow\rangle_i$ (b) Caso 2: $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} \sum_{k=7}^{10} |\uparrow\rangle_k \prod_{j \neq k} |\downarrow\rangle_j$ (c) Caso 3: $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} \sum_{k=7}^{10} (-1)^k |\uparrow\rangle_k \prod_{j \neq k} |\downarrow\rangle_j$

Figura 7 – As colunas de 1 à 10 se referem a ocupação média em cada sítio e coluna (D) é a soma das ocupações médias dos sítios da direita (7, 8, 9 e 10).

Esses resultados trazem indícios de que a geometria pode ser um elemento significativo no transporte de spins, visto que foi apresentada uma “preferência” em ocupar o lado que possui um maior número de sítios. Dessa maneira torna-se interessante verificar a ocorrência de retificação de correntes de magnetização (spin) para redes com assimetrias geométricas, sendo então necessário analisar o sistema no qual são acoplados reservatórios.

4.2 Correntes de spin em uma rede bidimensional aberta

Ao acoplar os reservatórios de spin à rede o sistema torna-se aberto, e portanto a sua dinâmica agora é regida pela equação mestra de Lindblad, sendo necessário utilizar formalismo de matriz densidade. Para investigar a retificação foram abordadas diferentes geometrias com 6, 8, 9 e 10 sítios para os modelos XX e XXZ, sendo também incluídos casos em que campos magnéticos externos homogêneos e não-homogêneos na direção z são aplicados.

4.2.1 Abordagem

4.2.1.1 Notação

O conjunto de reservatórios utilizados são separados em esquerda e direita. Reservatórios da esquerda (E) ficam em contato com os primeiros sítios $1, 2, 3, \dots, n_e$, onde n_e é o número de reservatórios na esquerda. Os da direita ficam em contato com os últimos sítios $N, N - 1, N - 2, \dots, N - n_d + 1$, onde n_d é o número de reservatórios da direita. Os sítios são enumerados como no caso fechado, da esquerda para a direita e de cima para baixo de acordo com a geometria. A Figura 9 apresenta um exemplo de como essa notação é empregada em uma rede triangular composta por 6 sítios.

4.2.1.2 Estado Estacionário

Matematicamente, os estados estacionários são determinados pela equação (2.20), porém ao fazer simulações é importante verificar que esse estado foi atingido. Uma propriedade desses estados é a estabilização do valor esperado da ocupação nos sítios no tempo, ou seja:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle = 0. \quad (4.4)$$

Da combinação dessa equação com a (3.11) pode-se concluir qualitativamente que a corrente que “entra” em um sítio deve ser a mesma que “sai”, podendo estender essa propriedade para o sistema como um todo, analisando apenas as extremidades, de forma que a corrente entre os primeiros sítios deve ser a mesma que nos últimos.

Em sistemas unidimensionais o valor da corrente pode ser calculado entre o primeiro e segundo sítio e comparado com a corrente entre os dois últimos sítios, como representado

na Figura 8. Já para sistemas bidimensionais pode-se verificar de uma maneira análoga, analisando a soma das correntes entre sítios em contato com os que estão nas extremidades, como representado na Figura 9 para uma rede com 6 sítios.

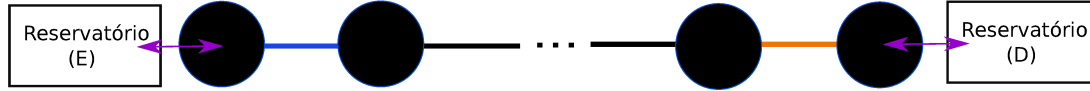


Figura 8 – Representação para N sítios no caso unidimensional: No estado estacionário a corrente entre os sítios do acoplamento em azul deve ser a mesma que entre os sítios do acoplamento em laranja.

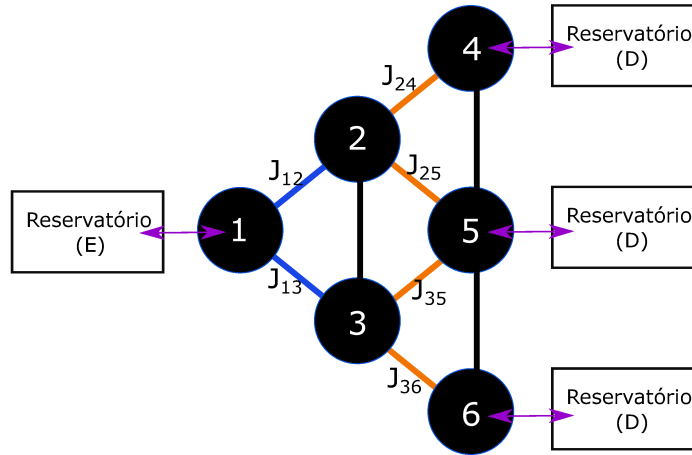


Figura 9 – Representação para 6 sítios no caso bidimensional: No estado estacionário a soma das correntes entre os sítios com acoplamento em azul deve ser a mesma que a soma das correntes entre os sítios com acoplamento em laranja.

Ou seja, para 6 sítios sabe-se que o sistema entrou no NESS quando

$$J_{12} + J_{13} = J_{24} + J_{25} + J_{35} + J_{36} \equiv J ,$$

e então o valor de J , adequando-se para cada geometria, é utilizado para calcular o coeficiente de retificação dado pela equação (3.13):

$$R = \frac{J(f) + J(-f)}{J(f) - J(-f)} .$$

4.2.1.3 Código

Para o sistema aberto as simulações foram realizadas no *software* Mathematica[®] [35], fazendo uso da biblioteca *qulib*¹ [36], que dispõe de algumas ferramentas matemáticas e equações utilizadas na área de Informação Quântica.

¹ Biblioteca desenvolvida pelo grupo *Quantum thermodynamics and quantum transport da IFUSP*

O programa consiste em vetorizar a equação de Lindblad e aplicar o operador de evolução temporal na matriz densidade do estado inicial, também vetorizada, como na equação (2.19). Foram utilizados valores de tempo na ordem de grandeza de 10^2 e 10^3 (em unidades de $1/\alpha$), que são uma boa estimativa para se obter o NESS, sendo esse valor baseado no tempo que a corrente leva para atingir um comportamento característico de estado estacionário para uma rede triangular de 6 sítios sem campo magnético externo. Os comportamentos das correntes $J(f)$ e $J(-f)$ desse caso estão representados nos gráficos 10 e 11. Pode-se observar que para $t > 20$ o sistema já está essencialmente no NESS em ambos os casos.

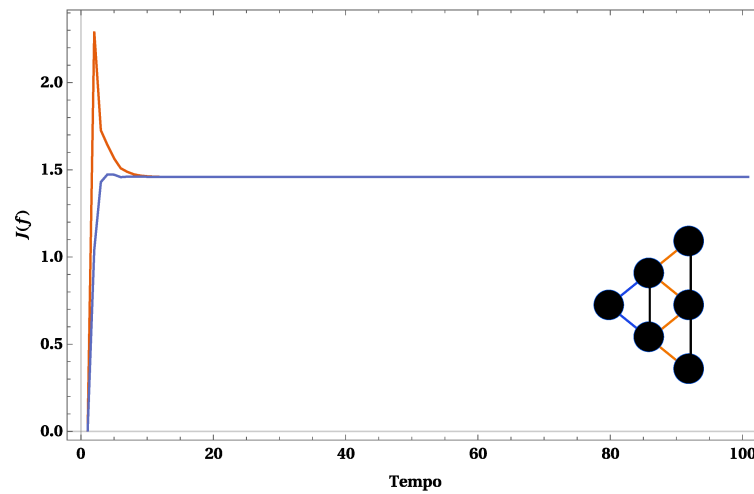


Figura 10 – Comportamento da corrente inserindo spins *up* na esquerda e retirando na direita

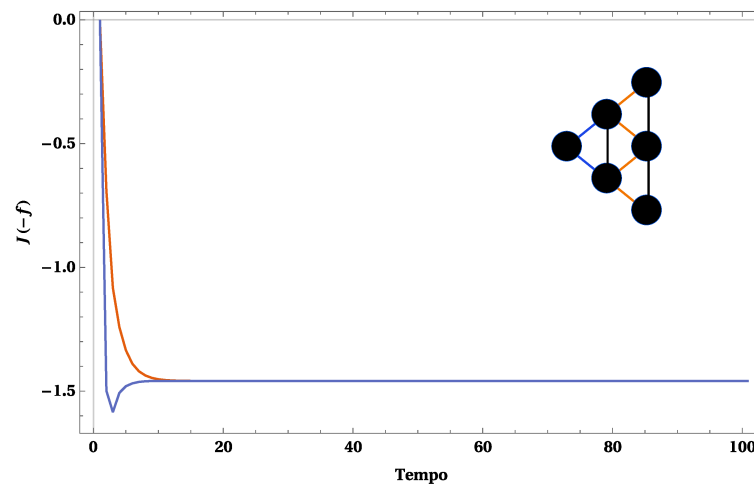


Figura 11 – Comportamento da corrente inserindo spins *up* na direita e retirando na esquerda.

O estado inicial considerado foi escolhido de forma arbitrária com todos os sítios em estado de spin *down*, porém por se tratar de um sistema que obedece as condições de unicidade de solução, o NESS não se altera [37].

O parâmetro f nos operadores de Lindblad (2.22) utilizado foi $f = \pm 1$, de forma que L_{\pm} atue apenas injetando ou retirando spins up nos sítios (considera-se a inserção de spins $down$ como a retirada de spins up), sendo que o f referente aos reservatórios da esquerda possui o sinal contrário do f referente aos reservatórios da direita. Já o parâmetro γ (2.13) dos reservatórios é definido de forma a se adequar com cada geometria e será especificado em cada caso.

Foram feitas simulações para o modelo XX ($\Delta = 0$) e para o XXZ, utilizando diferentes valores para o parâmetro de anisotropia Δ (3.1) e mantendo a interação $\alpha = 1.0$. Também foram incluídas situações com campos magnéticos externos homogêneos e não-homogêneos são aplicados.

4.2.2 Geometria triangular com 10 sítios

Uma das geometrias abordadas para o sistema aberto foi a triangular com 10 sítios, já analisada para sistemas fechados, e a configuração dos reservatórios está representada na Figura 12. Para essa rede os parâmetros dos reservatórios foram $\gamma_E = 1.0$ para o reservatório da esquerda e $\gamma_D = \gamma_E/4$ para cada reservatório da direita.

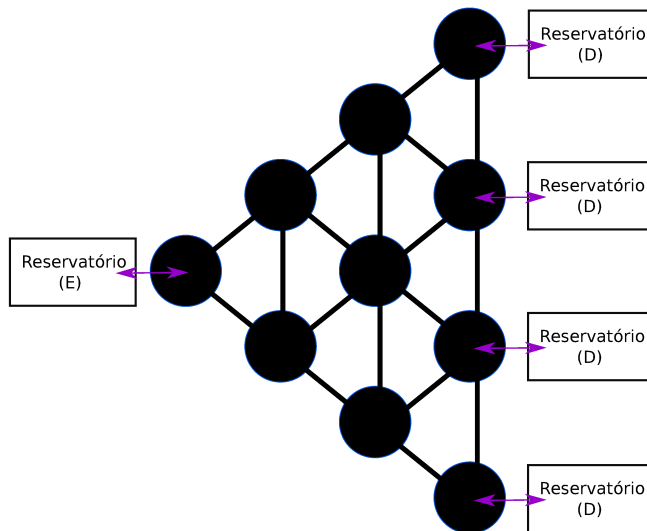


Figura 12 – Geometria com 10 sítios, um reservatório à esquerda e quatro à direita

4.2.2.1 Ausência de campo magnético e campo magnético homogêneo

O primeiro caso analisado foi na ausência de campos magnéticos externos e os resultados das simulações estão na tabela 1.

Tabela 1 – ($h_z = 0.0$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	1.3658	1.4356	1.39279	1.21865
$J(-f)$	-1.3658	-1.4356	-1.39279	-1.21865
R	0.0	0.0	0.0	0.0

No segundo caso foi aplicado um campo magnético homogêneo $h_z = 1.0$, ou seja o mesmo campo é aplicado separadamente em cada sítio. Os resultados desse estão na tabela 2.

Tabela 2 – ($h_z = 1.0$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	1.3658	1.4356	1.39279	1.21865
$J(-f)$	-1.3658	-1.4356	-1.39279	-1.21865
R	0.0	0.0	0.0	0.0

Os valores das correntes obtidos foram os mesmos em ambos os casos e não foi observada a ocorrência de retificação.

4.2.2.2 Campo magnético não-homogêneo

Os sítios dessa rede foram separados em colunas da seguinte forma:

- Sítio 1 pertence a coluna 1 (c1)
- Sítios 2 e 3 pertencem a coluna 2 (c2)
- Sítios de 4 à 6 pertencem a coluna 3 (c3)
- Sítios de 7 à 10 pertencem a coluna 4 (c4)

Foram escolhida três configurações para o campo magnético não-homogêneo de forma que cada coluna possua um valor diferente de campo aplicado em seus sítios separadamente.

1. Aumento do campo da esquerda para a direita

O campo aumenta em uma unidade para cada coluna de sítios, sendo esses campos dados por $h_z^{c1} = 1.0$, $h_z^{c2} = 2.0$, $h_z^{c3} = 3.0$ e $h_z^{c4} = 4.0$, como representado na Figura 13.

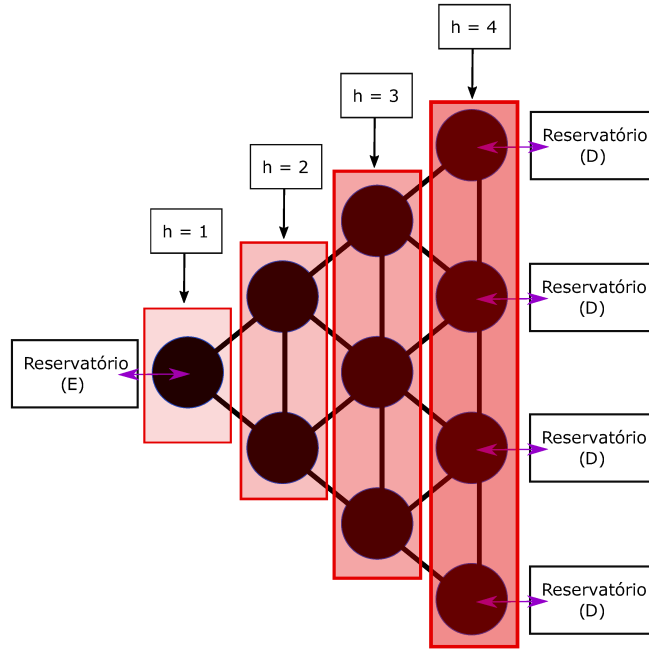


Figura 13 – Configuração do campo não-homogêneo aplicado aumentando em uma unidade da esquerda para a direita.

Os resultados obtidos para essa configuração estão na tabela 3. É interessante notar nesse caso que a retificação foi observada mesmo para o caso em que $\Delta = 0$, diferindo do que é visto nos modelos unidimensionais com interações entre primeiros vizinhos.

Tabela 3 – ($h_z = [1.0, 2.0, 2.0, 3.0, 3.0, 3.0, 4.0, 4.0, 4.0, 4.0]$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	0.46578	0.873172	1.0306	1.10121
$J(-f)$	-1.1355	-0.836558	-0.389088	-0.101546
R	-0.418241	0.0214149	0.451868	0.831144

2. Diminuição do campo da esquerda para a direita

O campo diminui em uma unidade em cada coluna de sítios, sendo esses campos dados por $h_z^{c1} = 4.0$, $h_z^{c2} = 3.0$, $h_z^{c3} = 2.0$ e $h_z^{c4} = 1.0$, como na Figura 14.

Os resultados obtidos para essa configuração estão na tabela 4. Como no caso anterior também foi observada a ocorrência de retificação, mesmo quando tratando-se do modelo XX.

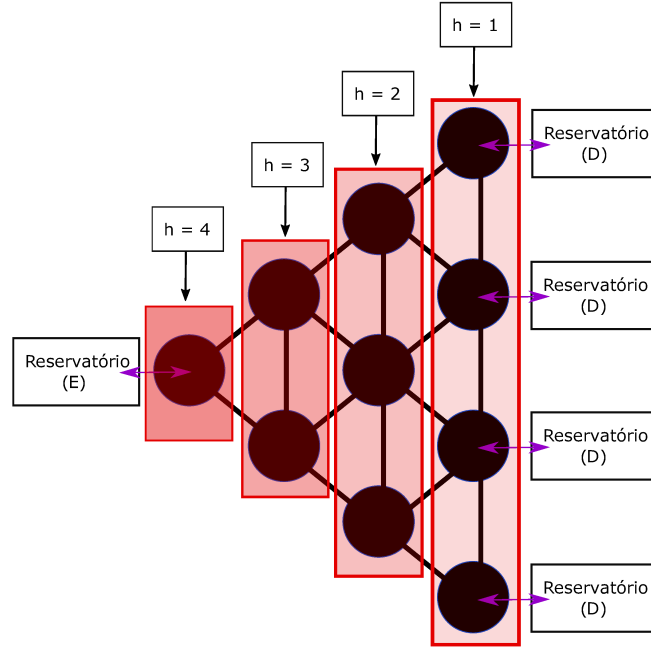


Figura 14 – Configuração do campo não-homogêneo aplicado diminuindo em uma unidade da esquerda para a direita.

Tabela 4 – ($h_z = [4.0, 3.0, 3.0, 2.0, 2.0, 2.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0]$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	1.1355	0.836558	0.389088	0.101546
$J(-f)$	-0.46578	-0.873172	-1.0306	-1.10121
R	0.418241	-0.0214149	-0.451868	-0.831144

3. A soma dos campos é igual em cada coluna

A soma dos valores dos campos permanece a mesma em cada coluna de sítios, ou seja a intensidade do campo em cada sítio é menor quanto mais sítios a coluna possui. Sendo esse campos $h_z^{c1} = 4.0$, $h_z^{c2} = 2.0$, $h_z^{c3} = 4.0/3$ e $h_z^{c4} = 1.0$, como na Figura 15. Os resultados obtidos para essa configuração estão na tabela 5.

Tabela 5 – ($h_z = [4.0, 2.0, 2.0, 4.0/3, 4.0/3, 4.0/3, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0]$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	1.12307	0.868201	0.478297	0.158456
$J(-f)$	-0.592087	-0.851994	-0.989092	-1.06864
R	0.309583	0.00942121	-0.348098	-0.741739

Nas três configurações de campo foram observadas a ocorrência de retificação, tanto para o modelo XX como para o XXZ. É interessante observar nas configurações 1 e 2 a

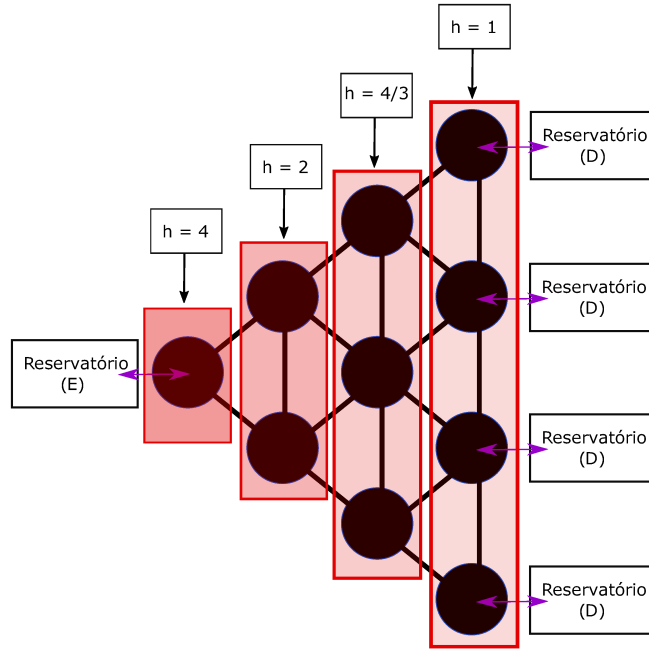


Figura 15 – Configuração do campo não-homogêneo aplicado onde a soma do campo total permanece a mesma em cada coluna de sítios.

ocorrência de uma inversão no valor dos módulos das correntes, gerando apenas uma troca de sinais no coeficiente de retificação, mantendo o mesmo valor absoluto. Esse resultado não era o que se esperava, pois o campo total aplicado em cada um dos casos não é o mesmo, apenas a variação por coluna.

4.2.3 Geometria com 8 sítios

Outra geometria utilizada foi com 8 sítios e sua configuração está representada na Figura 16. Os valores para os parâmetros dos reservatórios utilizados foram $\gamma_E = 1.0$ para o reservatório da esquerda e $\gamma_D = \gamma_E/2$ para cada reservatório da direita.

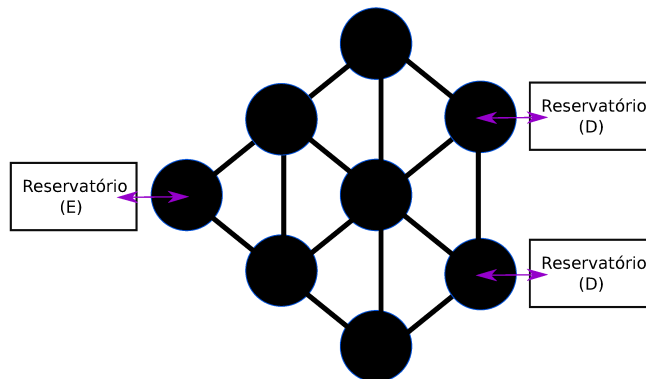


Figura 16 – Geometria com 8 sítios, um reservatório à esquerda e dois à direita.

Para fins de comparação e também melhor entender o papel da geometria foram analisados casos análogos aos que foram feitos para a geometria triangular com 10 sítios,

sem campos magnéticos e com campos magnéticos homogêneos e não-homogêneos.

4.2.3.1 Ausência de campo magnético e campo magnético homogêneo

Os resultados obtidos para o caso em que não há campo magnético externo estão na tabela 6 e com campo magnético homogêneo $h_z = 1.0$ na tabela 7.

Tabela 6 – ($h_z = 0.0, \alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	1.34811	1.40797	1.33243	1.25434
$J(-f)$	-1.34811	-1.40797	-1.33243	-1.25434
R	0.0	0.0	0.0	0.0

Tabela 7 – ($h_z = 1.0, \alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	1.34811	1.40797	1.33243	1.25434
$J(-f)$	-1.34811	-1.40797	-1.33243	-1.25434
R	0.0	0.0	0.0	0.0

Igualmente à geometria triangular com 10 sítios, os valores de corrente foram os mesmos na ausência de campo e com campo homogêneo. Também não foi observada a ocorrência de retificação nesses casos.

4.2.3.2 Campo magnético não-homogêneo

Os sítios dessa rede foram separados em colunas da seguinte forma:

- Sítio 1 pertence a coluna 1 (c1)
- Sítios 2 e 3 pertencem a coluna 2 (c2)
- Sítios de 4 à 6 pertencem a coluna 3 (c3)
- Sítios de 7 e 8 pertencem a coluna 4 (c4)

As configurações do campo utilizados são análogos aos escolhidos anteriormente, adequando-se ao número de sítios em cada coluna.

1. Aumento do campo da esquerda para a direita

O campo aumenta em uma unidade em cada coluna de sítios, sendo $h_z^{c1} = 1.0$, $h_z^{c2} = 2.0$, $h_z^{c3} = 3.0$ e $h_z^{c4} = 4.0$, como na Figura 17.

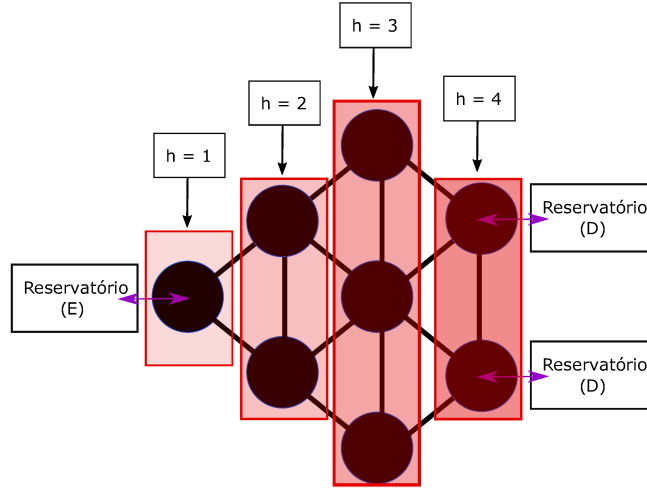


Figura 17 – Configuração do campo não-homogêneo aplicado aumentando em uma unidade da esquerda para a direita.

Os valores obtidos para essa configuração estão na tabela 8, onde pode-se observar novamente a ocorrência de retificação para ambos os modelos (XX e XXZ).

Tabela 8 – ($h_z = [1.0, 2.0, 2.0, 3.0, 3.0, 3.0, 4.0, 4.0]$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	0.533561	0.671163	0.757147	0.823525
$J(-f)$	-1.01633	-0.795389	-0.500622	-0.235537
R	-0.311486	-0.084706	0.203952	0.555197

2. Diminuição do campo da esquerda para a direita

Campo diminui em uma unidade em cada coluna, sendo $h_z^{c1} = 4.0$, $h_z^{c2} = 3.0$, $h_z^{c3} = 2.0$ e $h_z^{c4} = 1.0$, representado na Figura 18.

Os valores obtidos para essa configuração estão na tabela 9.

Tabela 9 – ($h_z = [4.0, 3.0, 3.0, 2.0, 2.0, 2.0, 1.0, 1.0]$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	1.01633	0.795389	0.500622	0.235537
$J(-f)$	-0.533561	-0.671163	-0.757147	-0.823525
R	0.311486	0.084706	-0.203952	-0.555197

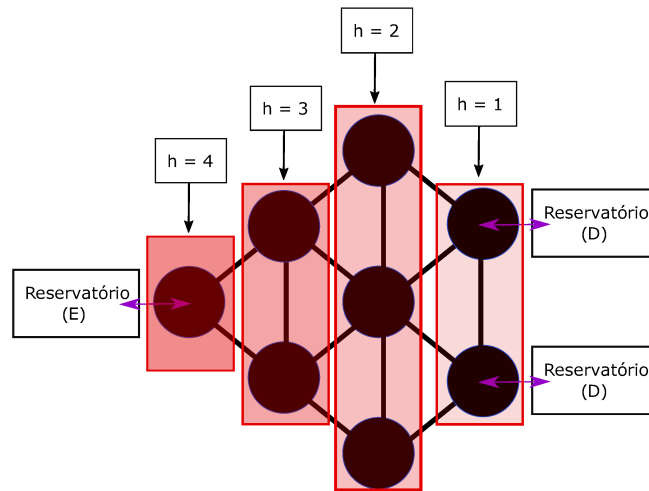


Figura 18 – Configuração do campo não-homôgeneo aplicado diminuindo em uma unidade da esquerda para a direita.

3. A soma dos campos é igual em cada coluna

A soma do valor do campo permanece o mesmo em cada coluna de sítios, sendo $h_z^{c1} = 4.0$, $h_z^{c2} = 2.0$, $h_z^{c3} = 4.0/3$ e $h_z^{c4} = 2.0$, representado na Figura 19.

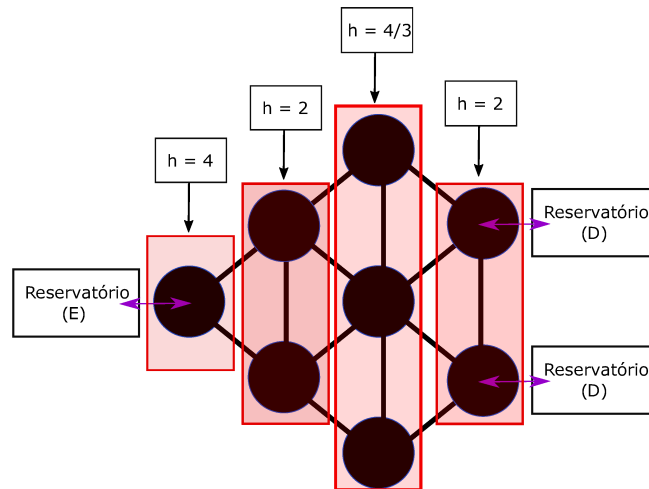


Figura 19 – Configuração do campo não-homôgeneo aplicado em que a soma em cada coluna permanece a mesma.

Os valores obtidos para essa configuração estão na tabela 10.

Tabela 10 – ($h_z = [4.0, 2.0, 2.0, 4.0/3, 4.0/3, 4.0/3, 2.0, 2.0]$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	1.25626	1.09032	0.788796	0.504493
$J(-f)$	-0.808996	-0.983108	-1.03375	-1.04371
R	0.216566	0.051708	-0.13440	-0.34829

A inversão entre os módulos das correntes também foi observada nessa geometria para as configurações de campo 1 e 2. Assim como a presença de retificação nos modelos XX e XXZ para as três configurações de campo.

4.2.4 Geometria retangular com 10 sítios

Para melhor entender o papel da geometria na ocorrência da retificação também foram simulados sistemas bidimensionais sem assimetria geométrica. Uma delas foi a geometria retangular (ou escada), representada na Figura 20. Para esse caso os parâmetros dos reservatórios possuem os mesmos valores: $\gamma_E = \gamma_D = 1.0$.

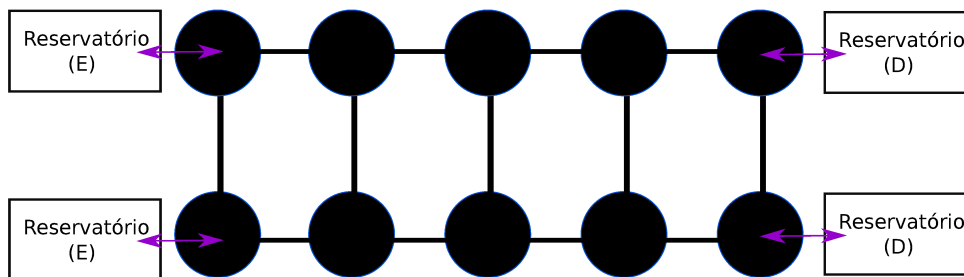


Figura 20 – Geometria retangular com 10 sítios, dois reservatórios à esquerda e dois à direita.

E da mesma forma, foram analisadas configurações de campo análogas as anteriormente utilizadas.

4.2.4.1 Ausência de campo magnético e campo magnético homogêneo

Os valores obtidos na ausência de campo magnético externo estão na tabela 11.

Tabela 11 – ($h_z = 0$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	0.724891	1.65685	1.70248	0.130106
$J(-f)$	-0.724891	-1.65685	-1.70248	-0.130106
R	0.0	0.0	0.0	0.0

Para essa geometria o caso com campo magnético externo homogêneo $h_z = 1.0$ também inclui o caso em que a soma dos campos é a mesma nas colunas e os resultados obtidos para essa configuração estão na tabela 12.

Tabela 12 – ($h_z = 1.0, \alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	0.724891	1.65685	1.70248	0.130106
$J(-f)$	-0.724891	-1.65685	-1.70248	-0.130106
R	0.0	0.0	0.0	0.0

Os valores de corrente obtidos foram os mesmos nos dois casos e também não foi observada a ocorrência de retificação em ambos, o que nesse caso já era esperado, pois nenhuma assimetria foi incluída.

4.2.4.2 Campo magnético não-homogêneo

Os sítios dessa rede foram separados em colunas da seguinte forma:

- Sítios 1 e 2 pertencem a coluna 1 (c1)
- Sítios 3 e 4 pertencem a coluna 2 (c2)
- Sítios de 5 e 6 pertencem a coluna 3 (c3)
- Sítios de 7 e 8 pertencem a coluna 4 (c4)
- Sítios de 9 e 10 pertencem a coluna 4 (c5)

1. Aumento do campo da esquerda para a direita

O campo aumenta em uma unidade em cada coluna de sítios, sendo $h_z^{c1} = 1.0$, $h_z^{c2} = 2.0$, $h_z^{c3} = 3.0$, $h_z^{c4} = 4.0$ e $h_z^{c5} = 5.0$, como na Figura 21.

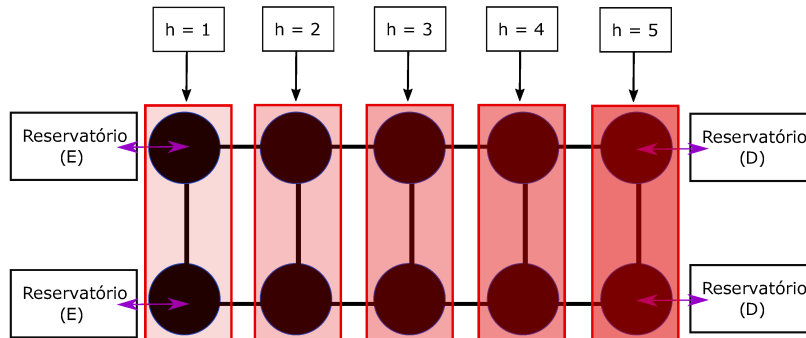


Figura 21 – Configuração do campo não-homogêneo aplicado aumentando em uma unidade da esquerda para a direita.

Os resultados obtidos para essa configuração estão na tabela 13.

Tabela 13 – ($h_z = [1.0, 1.0, 2.0, 2.0, 3.0, 3.0, 4.0, 4.0, 5.0, 5.0]$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	1.08752	1.18284	1.0638	1.0034
$J(-f)$	-1.08752	-0.338018	-0.0539881	-0.0111714
R	0.0	0.555492	0.903401	0.977978

2. Diminuição do campo da esquerda para a direita

O campo diminui em uma unidade em cada coluna de sítios, sendo esses campos dados por $h_z^{c1} = 5.0$, $h_z^{c2} = 4.0$, $h_z^{c3} = 3.0$, $h_z^{c4} = 2.0$ e $h_z^{c5} = 1.0$, como representado na Figura 22.

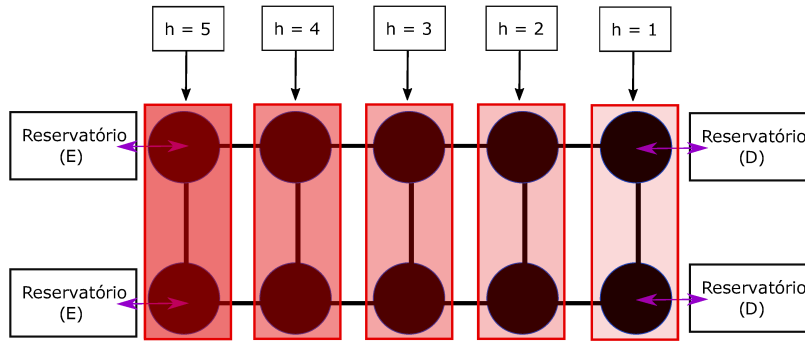


Figura 22 – Configuração do campo não-homogêneo aplicado diminuindo em uma unidade da esquerda para a direita.

Os resultados obtidos para essa configuração de campo estão na tabela 14.

Tabela 14 – ($h_z = [5.0, 5.0, 4.0, 4.0, 3.0, 3.0, 2.0, 2.0, 1.0, 1.0]$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	1.08752	0.338018	0.0539881	0.0111714
$J(-f)$	-1.08752	-1.18284	-1.0638	-1.0034
R	0.0	-0.555492	-0.903401	-0.977978

Em contraste com as geometrias abordadas anteriormente, não foi observada retificação para o modelo XX, apenas para o XXZ da mesma maneira como é observada em casos unidimensionais, com interação apenas entre primeiros vizinhos, citados anteriormente na seção 3.3.

4.2.5 Geometria retangular com 9 sítios

Outra geometria abordada sem assimetria foi a retangular com 9 sítios, representada na figura 23. Os parâmetros dos reservatórios aqui também possuem os mesmos valores $\gamma_E = \gamma_D = 1.0$.

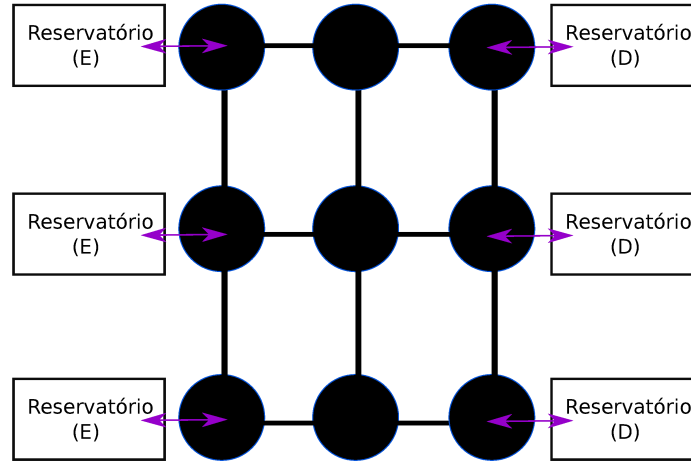


Figura 23 – Geometria retangular com 9 sítios, três reservatórios à esquerda e três à direita.

4.2.5.1 Ausência de campo magnético e campo magnético homogêneo

Os resultados para o caso de ausência de campo magnético externo estão na tabela 15 e para o caso de campo homogêneo na tabela 16.

Tabela 15 – ($h_z = 0, \alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	3.14279	3.08036	2.74325	2.12555
$J(-f)$	-3.14279	-3.08036	-2.74325	-2.12555
R	0.0	0.0	0.0	0.0

Tabela 16 – ($h_z = 1.0, \alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	3.14279	3.08036	2.74325	2.12555
$J(-f)$	-3.14279	-3.08036	-2.74325	-2.12555
R	0.0	0.0	0.0	0.0

Como nos casos anteriores, na ausência de campo magnético e com campo magnético homogêneo, os valores de corrente foram os mesmos e não foi observada retificação, como o esperado para esse caso em que não foram empregadas assimetrias.

4.2.5.2 Campo magnético não-homogêneo

Os sítios foram separados em colunas da seguinte forma:

- Sítios de 1 à 3 pertencem a coluna 1 (c1)
- Sítios de 4 à 6 pertencem a coluna 2 (c2)
- Sítios de 7 à 9 pertencem a coluna 3 (c3)

1. Aumento do campo da esquerda para a direita

O campo aumenta em uma unidade em cada coluna de sítios, sendo $h_z^{c1} = 1.0$, $h_z^{c2} = 2.0$ e $h_z^{c3} = 3.0$, representado na Figura 24.

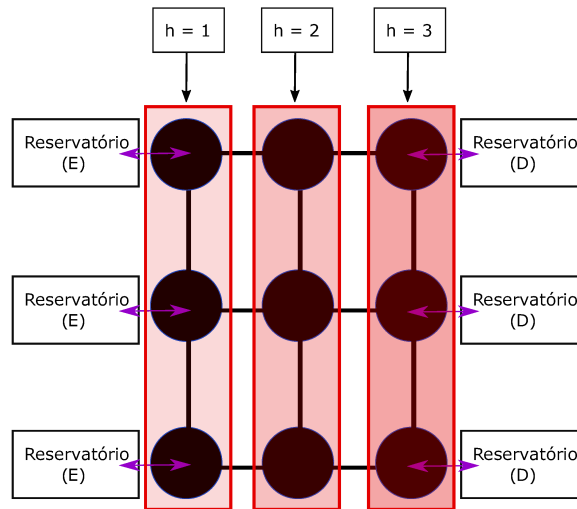


Figura 24 – Configuração do campo não-homogêneo aplicado aumentando em uma unidade da esquerda para a direita.

Os resultados obtidos para essa configuração estão na tabela 17.

Tabela 17 – ($h_z = [1.0, 1.0, 1.0, 2.0, 2.0, 2.0, 3.0, 3.0, 3.0]$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	2.9726	2.94864	2.73528	2.37672
$J(-f)$	-2.9726	-2.60173	-1.52072	-0.688133
R	0.0	0.0625029	0.285377	0.550952

2. Diminuição do campo da esquerda para a direita

O campo diminui em uma unidade em cada coluna de sítios, sendo $h_z^{c1} = 3.0$, $h_z^{c2} = 2.0$ e $h_z^{c3} = 1.0$. Como representado na Figura 25.

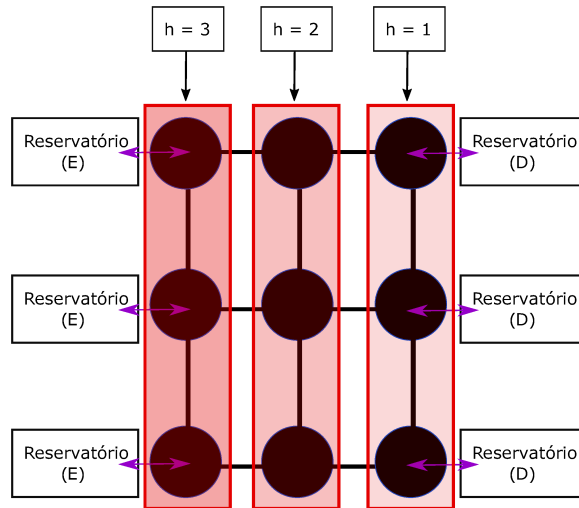


Figura 25 – Configuração do campo não-homogêneo aplicado diminuindo em uma unidade da esquerda para a direita.

Os resultados obtidos para essa configuração estão na tabela 18.

Tabela 18 – ($h_z = [3.0, 3.0, 3.0, 2.0, 2.0, 2.0, 1.0, 1.0, 1.0]$, $\alpha = 1.0$)

Parâmetro	$\Delta = 0.0$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 1.0$	$\Delta = 1.5$
$J(f)$	2.9726	2.60173	1.52072	0.688133
$J(-f)$	-2.9726	-2.94864	-2.73528	-2.37672
R	0.0	-0.0625029	-0.285377	-0.550952

Assim como na geometria retangular com 10 sítios, não foi observada a retificação para o modelo XX, apenas para o XXZ, contrário ao que ocorre nos casos com assimetria geométrica.

4.2.6 Geometrias com 6 sítios

Tendo em vista que para todas as geometrias abordadas anteriormente nenhuma apresentou retificação na ausência de campos não-homogêneos, foi realizada uma simulação para 6 sítios com os modelos XX e XXZ, na ausência de campos, em que todas as geometrias possíveis são testadas. Foram utilizadas duas configurações de reservatórios: A primeira foi mantendo um reservatório à esquerda e três à direita e a segunda com um reservatório à esquerda e dois à direita.

Por cobrir todas as possíveis geometrias, ocorreram casos em que foi observada a retificação, porém se tratavam de situações em que algum reservatório era excluído, fazendo com que a inserção e retirada de spins ficasse desbalanceada. Com exceção desses, em nenhum outro caso foi observada a ocorrência de retificação.

4.2.7 Reservatórios coletivos

Outra configuração para os reservatórios nos casos de geometrias assimétricas também foi considerada. Essa consistiu em acoplar um único reservatório à direita, tal que ele atuasse nos sítios dessa extremidade de forma coletiva, enquanto o reservatório da esquerda continuasse da mesma maneira. Essa configuração está representada na Figura 26 para a geometria de 10 sítios.

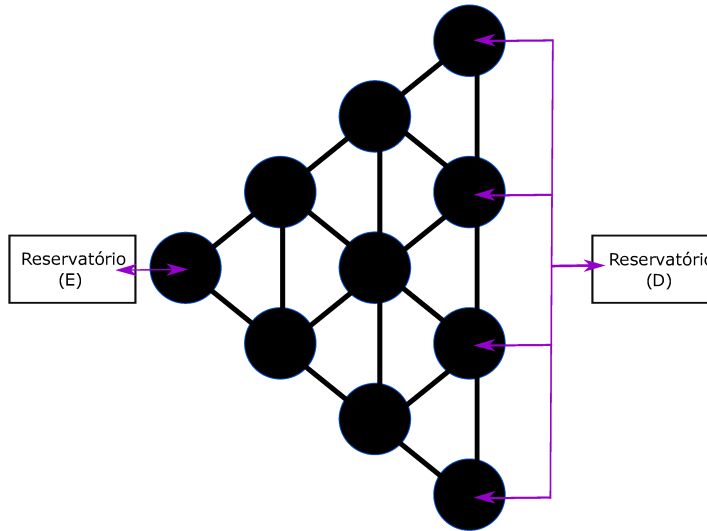


Figura 26 – Configuração do reservatório coletivo para a geometria triangular com 10 sítios

Foram considerados dois casos de reservatórios coletivos, um sem fases e o outro incluindo fases alternadas. Para a rede com 10 sítios, o caso sem fases foi descrito como:

$$L_D = \sqrt{1 \pm f_D} (\sigma_7^\pm + \sigma_8^\pm + \sigma_9^\pm + \sigma_{10}^\pm), \quad (4.5)$$

e para o caso com as fases alternadas foi:

$$L_D = \sqrt{1 \pm f_D} (\sigma_7^\pm + i \sigma_8^\pm + \sigma_9^\pm + i \sigma_{10}^\pm), \quad (4.6)$$

sendo análogo para o caso de 8 sítios.

Em comparação com os resultados obtidos para reservatórios individuais, ambas as redes assimétricas consideradas, com 8 e 10 sítios, não apresentaram diferenças significativas ao analisar os coeficientes de retificação. Foram observadas apenas pequenas alterações

nos valores das correntes, não trazendo grandes distinções sobre comportamento dos spins, mesmo quando as fases são incluídas.

4.3 Discussão dos resultados

Ao tratar os sistemas fechados, em ambas as geometrias abordadas foram observadas propensões das ocupações para o lado em que haviam mais sítios disponíveis, dando indícios de que a assimetria geométrica possa influenciar no transporte de spins. Assim sendo, tornou-se interessante verificar o comportamento das correntes dentro das redes, sendo então analisado diferentes geometrias para sistemas em contato com reservatórios de magnetização.

Quando abordados os sistemas abertos, nenhuma geometria apresentou a ocorrência de retificação na ausência de campos magnéticos não-homogêneos, porém algumas distinções foram observadas entre os casos simétricos e assimétricos.

O comportamento nas cadeias que não dispõem da assimetria geométrica apresentaram-se análogos ao que é observado em sistemas unidimensionais com interações entre primeiros vizinhos. Isto é, para o modelo XX a retificação não é observada e para o XXZ ela ocorre apenas na presença de campos não-homogêneos. Nesses foi observado, em ambas as geometrias, que o sistema retifica mais intensamente conforme o parâmetro Δ aumenta e também verifica-se a troca de sinais de R ao inverter a configuração dos campos magnéticos.

Nas redes assimétricas algumas diferenças foram observadas para o modelo XX, que apresentou retificação quando aplicado um campo magnético não-homogêneo em ambas as geometrias. É interessante observar nessas redes a ocorrência de uma troca de sinais no coeficiente de retificação, não apenas ao inverter a configuração dos campos magnéticos, mas também ao variar os valores de Δ .

Já a soma total dos campos magnéticos aplicados sobre o sistema não apresentou um papel tão importante, mas sim como ele é distribuído. Isso pode ser verificado ao comparar os casos assimétricos ao inverter a disposição dos campos, que continuam com os mesmos valores de R em módulo, porém com diferentes valores para o campo total aplicado.

Esses resultados indicam que a geometria do sistema pode interferir no transporte de spins, no entanto essa característica só ganha um papel relevante quando há elementos que gerem outras formas de assimetria, como é o caso do campo magnético não-homogêneo.

5 Conclusões

Nessa dissertação foram explorados os comportamentos das correntes de magnetização em redes de spin bidimensionais com e sem o acoplamento de reservatórios, regidos pelos modelos XX e XXZ com diferentes geometrias, incluindo casos simétricos e assimétricos.

Primeiramente, foi realizada uma breve revisão sobre sistemas quânticos fechados abordando sua descrição, evolução temporal e cálculo de observáveis. Em seguida foi discorrido sobre sistemas quânticos abertos, equação mestra de Lindblad, a obtenção da solução para o estado estacionário de não-equilíbrio e a descrição dos operadores de Lindblad como reservatórios de spin. Também foram discutidos os modelos utilizados, correntes de magnetização e o fenômeno de retificação, trazendo alguns resultados já obtidos anteriormente na literatura para sistemas unidimensionais.

Para adquirir uma primeira intuição sobre o problema abordado, são investigadas redes de spin bidimensionais isoladas, regidas pelo modelo XX e dotadas de assimetria geométrica, sendo analisados os comportamentos das ocupações em cada sítio para verificar a existência de uma propensão na rede. Observou-se maiores ocupações no lado que apresentava um maior número de sítios em ambas as geometrias consideradas e para os três estados iniciais escolhidos. Baseando-se nesses resultados, inferiu-se que a geometria possa interferir no transporte de spins ao longo da rede.

Em seguida considerou-se redes em contato com reservatórios de spin com diferentes geometrias, modelos e configurações, incluindo campos magnéticos externos homogêneos e não-homogêneos. Foram calculadas as correntes e coeficientes de retificação para todos os casos abordados.

Foram exploradas duas geometrias providas de assimetria geométrica, uma com 10 e outra com 8 sítios. Os casos na ausência de campo magnético externo e com campo magnético homogêneo resultaram nos mesmos valores de corrente em cada geometria e não foram observadas retificações. Já na presença de campos magnéticos não-homogêneos, foi constatada a ocorrência de retificação tanto no modelo XX como no XXZ em ambas as geometrias. Em contrapartida, as geometrias com 9 e 10 sítios que não possuíam assimetria, a retificação ocorreu apenas para o modelo XXZ na presença de campos não-homogêneos, analogamente ao que é observado em sistemas unidimensionais com interações entre primeiros vizinhos.

Também foram simuladas todas as geometrias possíveis com 6 sítios, impondo um número fixo de reservatórios em cada lado, para os modelos XX e XXZ na ausência de campos magnéticos externos. Exceto para situações em que pelo menos um dos reservatórios

foi rejeitado, nenhuma geometria apresentou valores diferentes de zero para o coeficiente de retificação.

Por fim, foram considerados reservatórios coletivos para as redes com assimetria geométrica, com 8 e 10 sítios. Os valores obtidos para as correntes pouco diferiram dos casos anteriores, não gerando retificações significativamente diferentes do que foi obtido para os casos com reservatórios individuais.

Com isso, conclui-se que a assimetria geométrica do sistema torna-se um ingrediente a ser levado em consideração no transporte de spins, mas quando tratando-se de retificação, outros elementos que causem assimetrias no sistema são necessários para que ela ocorra, como foi o caso aqui do campo magnético externo não-homogêneo.

Posteriormente, pode vir a ser interessante demonstrar matematicamente a não ocorrência de retificação para um número arbitrário de sítios em redes bidimensionais na ausência de campos não-homogêneos, e também estudar a influência da geometria nos modelos XX e XXZ para correntes de energia, a qual é possui uma sensibilidade maior do que a corrente de magnetização quando feitas mudanças no sistema.

Referências

- [1] Chang, Chih Wei, D Okawa, A Majumdar e A Zettl: *Solid-state thermal rectifier*. Science, 314(5802):1121–1124, 2006. Citado na página 13.
- [2] Li, Baowen, Lei Wang e Giulio Casati: *Thermal diode: Rectification of heat flux*. Physical review letters, 93(18):184301, 2004. Citado na página 13.
- [3] Ruokola, Tomi e Teemu Ojanen: *Single-electron heat diode: Asymmetric heat transport between electronic reservoirs through Coulomb islands*. Physical Review B, 83(24):241404, 2011. Citado na página 13.
- [4] Fukuhara, Takeshi, Adrian Kantian, Manuel Endres, Marc Cheneau, Peter Schauß, Sebastian Hild, David Bellem, Ulrich Schollwöck, Thierry Giamarchi, Christian Gross et al.: *Quantum dynamics of a mobile spin impurity*. Nature Physics, 9(4):235–241, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 27.
- [5] Kinoshita, Toshiya, Trevor Wenger e David S Weiss: *A quantum Newton’s cradle*. Nature, 440(7086):900–903, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 27.
- [6] Meinert, Florian, Manfred J Mark, Emil Kirilov, Katharina Lauber, Philipp Weinmann, Andrew J Daley e H C Nägerl: *Quantum quench in an atomic one-dimensional Ising chain*. Physical review letters, 111(5):053003, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 27.
- [7] Kaufman, Adam M, M Eric Tai, Alexander Lukin, Matthew Rispoli, Robert Schittko, Philipp M Preiss e Markus Greiner: *Quantum thermalization through entanglement in an isolated many-body system*. Science, 353(6301):794–800, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 27.
- [8] Landi, Gabriel T, E Novais, Mário J de Oliveira e Dragi Karevski: *Flux rectification in the quantum X X Z chain*. Physical Review E, 90(4):042142, 2014. Citado 5 vezes nas páginas 13, 14, 22, 29 e 30.
- [9] Schuab, Lucas, Emmanuel Pereira e Gabriel T Landi: *Energy rectification in quantum graded spin chains: Analysis of the XXZ model*. Physical Review E, 94(4):042122, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 13, 14 e 65.
- [10] Zhang, Lifa, Yonghong Yan, Chang Qin Wu, Jian Sheng Wang e Baowen Li: *Reversal of thermal rectification in quantum systems*. Physical Review B, 80(17):172301, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 14.

-
- [11] Souza, Alexandre Ferrari de: *Retificadores monofásicos de alto fator de potência com reduzidas perdas de condução e comutação suave*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1998. Citado na página 14.
- [12] Blauth, Yeddo Braga: *Retificadores trifásicos controlados com elevado fator de potência e multiníveis de corrente*. Tese de Doutorado, Univeridade Federal de Santa Catarina, 1999. Citado na página 14.
- [13] Cruz, Cicero Marcos Tavares: *Retificador trifasico a diodos, de baixo custo, com correção de fator de potencia*. Tese de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1993. Citado na página 14.
- [14] Balachandran, Vinitha, Giuliano Benenti, Emmanuel Pereira, Giulio Casati e Dario Poletti: *Perfect diode in quantum spin chains*. Physical review letters, 120(20):200603, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 31.
- [15] Oliveira, Deborah, Emmanuel Pereira e Humberto CF Lemos: *One-way street for the energy current: A ubiquitous phenomenon in boundary-driven quantum spin chains*. EPL (Europhysics Letters), 129(1):10001, 2020. Citado na página 14.
- [16] Hoogdalem, Kevin A van e Daniel Loss: *Rectification of spin currents in spin chains*. Physical Review B, 84(2):024402, 2011. Citado na página 14.
- [17] Schuab, Lucas Lage: *Retificação de energia e magnetização em cadeias quânticas de spin: Análise do modelo XXZ*. Tese de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 22.
- [18] Wang, Huan, Yu Yang, Hongyuan Chen, Nianbei Li e Lifa Zhang: *Thermal rectification induced by geometrical asymmetry: A two-dimensional multiparticle Lorentz gas model*. Physical Review E, 99(6):062111, 2019. Citado na página 14.
- [19] Sakurai, Jun John, Jim Napolitano *et al.*: *Modern quantum mechanics*, volume 185. Pearson Harlow, 2014. Citado na página 17.
- [20] Silva Souza, Leonardo da: *Decoerência de sistemas quânticos induzida por cadeias de spin*. Tese de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2016. Citado na página 18.
- [21] Breuer, Heinz Peter e Francesco Petruccione: *The theory of quantum open systems*. New York, 2002. Citado 3 vezes nas páginas 18, 19 e 20.
- [22] Gorini, Vittorio, Andrzej Kossakowski e Ennackal Chandy George Sudarshan: *Completely positive dynamical semigroups of N-level systems*. Journal of Mathematical Physics, 17(5):821–825, 1976. Citado na página 20.

- [23] Lindblad, Goran: *On the generators of quantum dynamical semigroups*. Communications in Mathematical Physics, 48(2):119–130, 1976. Citado na página 20.
- [24] Baxter, Rodney J: *Eight-vertex model in lattice statistics*. Physical Review Letters, 26(14):832, 1971. Citado na página 27.
- [25] Sutherland, B, CN Yang e CP Yang: *Exact solution of a model of two-dimensional ferroelectrics in an arbitrary external electric field*. Physical Review Letters, 19(10):588, 1967. Citado na página 27.
- [26] Cao, Junpeng, Wen Li Yang, Kangjie Shi e Yupeng Wang: *Off-diagonal Bethe ansatz and exact solution of a topological spin ring*. Physical review letters, 111(13):137201, 2013. Citado na página 27.
- [27] Baxter, Rodney J: *Exactly solved models in statistical mechanics*. Elsevier, 2016. Citado na página 27.
- [28] Tasaki, H: *The Hubbard Model: Introduction and Selected Rigorous Results*. eprint. arXiv preprint cond-mat/9512169, 1995. Citado na página 27.
- [29] Baxter, RJ: *One-dimensional anisotropic Heisenberg chain*. Physical Review Letters, 26(14):834, 1971. Citado na página 27.
- [30] Maekawa, Sadamichi, Sergio O Valenzuela, Eiji Saitoh e Takashi Kimura: *Spin current*, volume 22. Oxford University Press, 2017. Citado na página 28.
- [31] Starr, Chauncey: *The copper oxide rectifier*. Physics, 7(1):15–19, 1936. Citado na página 30.
- [32] Paula Júnior, Alberto Luiz de: *Cadeias de spin fora do equilíbrio: efeito cone de luz e retificação de correntes de spin e energia*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2019. Citado na página 30.
- [33] Pereira, Emmanuel: *Rectification and one-way street for the energy current in boundary-driven asymmetric quantum spin chains*. Physical Review E, 95(3):030104, 2017. Citado na página 30.
- [34] MATLAB: *9.7.0.1190202 (R2019b)*. The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, 2018. Citado na página 35.
- [35] Inc., Wolfram Research,: *Mathematica, Version 12.1*. <https://www.wolfram.com/mathematica>, Champaign, IL, 2020. Citado na página 38.
- [36] *Biblioteca qulib*. <http://www.fmt.if.usp.br/~gtlandi/qulib.html>. Accessed: 2020-03-24. Citado na página 38.

- [37] Prosen, Tomaž: *Matrix product solutions of boundary driven quantum chains*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 48(37):373001, 2015. Citado na página 39.

Apêndices

APÊNDICE A – Vetorização

A.1 Definição

Seja $A = (a_1, a_2, \dots, a_n) \in \mathbb{C}^{m \times n}$, em que $a_j \in \mathbb{C}^m$, $j = 1, 2, \dots, n$. Define-se a operação de vetorização da matriz A como [9]:

$$\text{vec}(A) \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{m \cdot n}. \quad (\text{A.1})$$

E para quaisquer matrizes $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, $B \in \mathbb{F}^{n \times p}$ e $C \in \mathbb{C}^{p \times q}$, a verificada a identidade:

$$\text{vec}(ABC) = (C^\top \otimes A)\text{vec}(B). \quad (\text{A.2})$$

A.2 Vetorização da equação de Lindblad

Todos os termos da equação de Lindblad podem ser escritos no formato $(A\rho C)$ e portanto podemos utilizar a identidade (A.2):

$$\begin{aligned} \text{vec}(A\rho C) &= (C^\top \otimes A) |\rho\rangle \\ \text{vec}(A\rho) &= \text{vec}(A\rho\mathbb{1}) = (\mathbb{1} \otimes A) |\rho\rangle \\ \text{vec}(\rho C) &= \text{vec}(\mathbb{1}\rho C) = (C^\top \otimes \mathbb{1}) |\rho\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

e dessa forma:

$$\begin{aligned} \text{vec}(-i[H, \rho]) &= -i\text{vec}(H\rho\mathbb{1} - \mathbb{1}\rho H) = -i(\mathbb{1} \otimes H - H^\top \otimes \mathbb{1}) |\rho\rangle \\ \text{vec}(L_j\rho L_j^\dagger) &= (L_j^* \otimes L_j) |\rho\rangle \\ \text{vec}(L_j^\dagger L_j\rho) &= \text{vec}(L_j^\dagger L_j\rho\mathbb{1}) = (\mathbb{1} \otimes L_j^\dagger L_j) |\rho\rangle \\ \text{vec}(\rho L_j^\dagger L_j) &= \text{vec}(\mathbb{1}\rho L_j^\dagger L_j) = ((L_j^\dagger L_j)^\top \otimes \mathbb{1}) |\rho\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

obtendo então a equação vetorizada:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\rho\rangle &= [-i((\mathbb{1} \otimes H) - (H^\top \otimes \mathbb{1})) \\ &\quad + \sum_j (L_j^* \otimes L_j) - \frac{1}{2}(\mathbb{1} \otimes L_j^\dagger L_j + (L_j^\dagger L_j)^\top \otimes \mathbb{1})] |\rho\rangle. \end{aligned}$$

APÊNDICE B – Corrente para sítios fora das extremidades

B.1 Redes unidimensionais

Para cadeias de spin em que a Hamiltoniana é dada por:

$$H = \sum_j \alpha(\sigma_k^x \sigma_{k+1}^x + \sigma_k^y \sigma_{k+1}^y) + \Delta(\sigma_k^z \sigma_{k+1}^z),$$

a equação de continuidade para sítios que não estão em contato com os reservatórios é dada por:

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

então:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle &= 2\alpha \langle \sigma_{k-1}^x \sigma_k^y - \sigma_{k-1}^y \sigma_k^x \rangle - 2\alpha \langle \sigma_k^x \sigma_{k+1}^y - \sigma_k^y \sigma_{k+1}^x \rangle \\ &= J_{k-1} - J_k, \end{aligned}$$

onde J_k é a corrente entre os sítios k e $k+1$.

B.2 Redes bidimensionais sem campo magnético externo

Para redes bidimensionais em que os sítios não pertencem às extremidades, ou seja, não estão em contato com os reservatórios, não é necessário incluir os operadores de Lindblad. Dessa forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle &= -i \text{Tr}([H, \rho] \sigma_k^z) \\ &= -i \text{Tr}(H \rho \sigma_k^z - \rho H \sigma_k^z) \\ &= -i \text{Tr}(\rho \sigma_k^z H - \rho H \sigma_k^z) \\ &= -i \text{Tr}(\rho [\sigma_k^z, H]) \\ &= -i \langle [\sigma_k^z, H] \rangle. \end{aligned}$$

Calculando o comutador $[\sigma_k^z, H]$:

$$\begin{aligned}
[\sigma_k^z, H] &= \sigma_k^z \left(\sum_{\langle i,j \rangle} (\alpha_x \sigma_i^x \sigma_j^x + \alpha_y \sigma_i^y \sigma_j^y) \right) - \left(\sum_{\langle i,j \rangle} (\alpha_x \sigma_i^x \sigma_j^x + \alpha_y \sigma_i^y \sigma_j^y) \right) \sigma_k^z \\
&= \sum_{\langle i,j \rangle} (\alpha_x \sigma_k^z \sigma_i^x \sigma_j^x + \alpha_y \sigma_k^z \sigma_i^y \sigma_j^y) - \sum_{\langle i,j \rangle} (\alpha_x \sigma_i^x \sigma_j^x \sigma_k^z - \alpha_y \sigma_i^y \sigma_j^y \sigma_k^z) \\
&= \sum_{\langle i,j \rangle} [\alpha_x (i\delta_{ik} \sigma_i^y) \sigma_j^x + \alpha_y (-i\delta_{ik} \sigma_i^x) \sigma_j^y] - \sum_{\langle i,j \rangle} [\alpha_x \sigma_i^x (-i\delta_{jk} \sigma_j^y) - \alpha_y \sigma_i^y (i\delta_{jk} \sigma_j^x)] \\
&= i \sum_j [\alpha_x \sigma_k^y \sigma_j^x - \alpha_y \sigma_k^x \sigma_j^y + \alpha_x \sigma_j^x \sigma_k^y - \alpha_y \sigma_j^y \sigma_k^x],
\end{aligned}$$

mas como $k \neq j$, $[\sigma_j^a, \sigma_k^b] = 0$, pois atuam em subespaços diferentes. Então:

$$[\sigma_k^z, H] = 2i \sum_j (\alpha_x \sigma_k^y \sigma_j^x - \alpha_y \sigma_k^x \sigma_j^y)$$

e portanto,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle &= -i \left\langle 2i \sum_j (\alpha_x \sigma_k^y \sigma_j^x - \alpha_y \sigma_k^x \sigma_j^y) \right\rangle \\
&= 2 \sum_j \langle \alpha_x \sigma_k^y \sigma_j^x - \alpha_y \sigma_k^x \sigma_j^y \rangle,
\end{aligned}$$

tal que o somatório em j são para sítios em contato com o sítio k . E para o caso isotrópico ($\alpha_x = \alpha_y \equiv \alpha$) temos a equação de continuidade:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle = 2\alpha \sum_j \langle \sigma_k^y \sigma_j^x - \sigma_k^x \sigma_j^y \rangle$$

B.3 Incluindo campo magnético externo

Quando um campo magnético externo é incluído, adiciona-se o termo de interação V dada pela equação (3.3), sendo a nova Hamiltoniana é dada por $H' = H + V$, temos:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \sigma_k^z \rangle &= -i \text{Tr}([H + V, \rho] \sigma_k^z) \\
&= -i \text{Tr}(\rho [\sigma_k^z, H + V]) \\
&= -i \text{Tr}(\rho [\sigma_k^z, H]) - i \text{Tr}(\rho [\sigma_k^z, V]).
\end{aligned}$$

Calculando o comutador $[\sigma_k^z, V]$:

$$\begin{aligned}
[\sigma_k^z, V] &= [\sigma_k^z, \sum_j h_j \sigma_j^a] \\
&= - \sum_j h_j [\sigma_j^a, \sigma_k^z] \\
&= - \sum_j h_j 2i \delta_{ik} \varepsilon_{abz} \sigma_i^b \\
&= -2i h_k \varepsilon_{abz} \sigma_k^b.
\end{aligned}$$

Logo,

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_k^z\rangle = 2\alpha\sum_j\langle\sigma_k^y\sigma_j^x - \sigma_k^x\sigma_j^y\rangle - 2h_k\varepsilon_{abz}\langle\sigma_k^b\rangle. \quad (\text{B.1})$$