

**PEDRO DARDENGO MESQUITA**

**SOBRE A DINÂMICA E TERMODINÂMICA DE ESTADOS COERENTES  
DISSIPATIVOS EM SISTEMAS MAGNÉTICOS**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

Orientador: Antônio Ribeiro de Moura

**VIÇOSA - MINAS GERAIS  
2020**

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade  
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

M582s  
2020  
Mesquita, Pedro Dardengo, 1996-  
Sobre a dinâmica e termodinâmica de estados coerentes  
dissipativos em sistemas magnéticos / Pedro Dardengo Mesquita.  
– Viçosa, MG, 2020.  
68 f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Inclui apêndice.

Orientador: Antonio Ribeiro de Moura.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 66-68.

1. Ferromagnetismo. 2. Spin. 3. Spintrônica.  
I. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Física.  
Programa de Pós-Graduação em Física. II. Título.

CDD 22. ed. 538.44

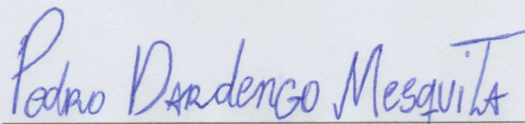
PEDRO DARDENGO MESQUITA

**SOBRE A DINÂMICA E TERMODINÂMICA DE ESTADOS COERENTES  
DISSIPATIVOS EM SISTEMAS MAGNÉTICOS**

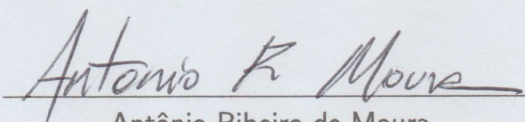
Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 18 de dezembro de 2020.

Assentimento:



Pedro Dardengo Mesquita  
Autor



Antônio Ribeiro de Moura  
Orientador

Sou muito grato ao professor Antônio que teve a paciência e a dedicação em fazer o possível para me inserir em um projeto de pesquisa científica.

## **AGRADECIMENTOS**

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

## RESUMO

MESQUITA, Pedro Dardengo, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, dezembro de 2020. **Sobre a dinâmica e termodinâmica de estados coerentes dissipativos em sistemas magnéticos.** Orientador: Antônio Ribeiro de Moura.

Neste trabalho desenvolvemos um modelo quântico utilizando Hamiltonianas não-Hermitianas para estudar a dissipação de ondas de spin em sistemas magnéticos que são descritos por estados coerentes. Mais especificamente, estudamos como a adição de um termo não-Hermitiano à Hamiltoniana de um ferromagneto imerso em campos magnéticos pode explicar a dissipação de ondas de spin. O trabalho ocorre no contexto da ressonância ferromagnética onde surgem naturalmente estados coerentes de mágnons. Nos propusemos também a estudar a termodinâmica deste modelo. Esta estratégia difere da estratégia comum na literatura que consiste em descrever ondas de spin utilizando modelos semi-clássicos, pois a estratégia de utilização de termos não-Hermitianos é puramente quântica. As metodologias de cálculo desenvolvidas nesse trabalho, utilizando os formalismos de termos não-Hermitianos aliados ao quadro de interação, são inéditas e podem ser generalizados para descrições de outros sistemas que se beneficiariam em serem descritos pelo mesmo formalismo.

Palavras-chave: Spintrônica. Relaxação de Spin. Ferromagnetismo.

## ABSTRACT

MESQUITA, Pedro Dardengo, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, December, 2020. **On the dynamics and thermodynamics of dissipative coherent states in magnetic models.** Advisor: Antônio Ribeiro de Moura.

In this work we developed a quantum model using non-Hermitian Hamiltonians to study dissipation of spin waves in magnetic models that are described by coherent states. More specifically, we study how the addition of a non-Hermitian term in the Hamiltonian which describes a ferromagnet in the presence of magnetic fields could explain dissipation of spin waves. The work is based on the context of ferromagnetic resonance where coherent states arise naturally. We have also studied the thermodynamics of this model. This strategy differs from the usual strategy in the literature in which dissipation of spin waves is described through semi-classical models, because the strategy of using non-Hermitian terms is based purely on a quantum description. The analytical methods developed in this work, using non-Hermitian terms and the interaction picture, can be generalized to other systems that would benefit from using the same formalism.

Keywords: Spintronics. Spin Relaxation. Ferromagnetism.

## SUMÁRIO

<b>I</b>	<b>Introdução</b>	<b>8</b>
<b>II</b>	<b>Revisão Bibliográfica</b>	<b>12</b>
2.1	Formalismos da mecânica quântica . . . . .	12
2.2	Teoria da resposta linear . . . . .	15
2.3	Hamiltoniana de Heisenberg . . . . .	16
2.3.1	Interpretação física . . . . .	17
2.3.2	Demonstração formal . . . . .	19
2.4	Mágnons e ondas de spin . . . . .	20
2.4.1	Relação de dispersão . . . . .	22
2.4.2	Capacidade térmica atribuída aos mágnons . . . . .	24
2.4.3	Temperatura de ordenamento . . . . .	25
2.5	Estados coerentes . . . . .	26
2.5.1	Estados coerentes térmicos . . . . .	30
2.5.2	Estados quânticos macroscópicos e estados coerentes . . . . .	31
2.6	Estados coerentes de mágnons . . . . .	32
2.6.1	A origem dos estados coerentes . . . . .	33
2.6.2	Magnetização e suscetibilidade magnética no modelo . . . . .	36
2.7	Termodinâmica de estados coerentes de mágnons . . . . .	39
2.8	Mecânica quântica não-Hermitiana . . . . .	40
<b>III</b>	<b>Estados coerentes de mágnons dissipativos</b>	<b>44</b>
3.1	Dissipação no formalismo de interação . . . . .	44
3.2	Inserção do termo não-hermitiano . . . . .	46
3.3	Dinâmica do campo de spin . . . . .	49
3.4	Regime não-forçado . . . . .	52
<b>IV</b>	<b>Termodinâmica de estados coerentes de mágnons dissipativos</b>	<b>55</b>
4.1	Médias termodinâmicas . . . . .	55
4.2	Dinâmica do campo de spin . . . . .	58
4.3	Amplitude de propagação de ondas de Spin . . . . .	60
<b>V</b>	<b>Conclusão</b>	<b>62</b>
5.1	Análise do modelo . . . . .	62
<b>A</b>	<b>Cálculo do valor esperado em tempos distintos</b>	<b>64</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>66</b>

# Capítulo I

## Introdução

A spintrônica é uma área ativa de pesquisa em matéria condensada que se preocupa em estudar o spin e o momento magnético associado ao elétron em dispositivos de estado sólido. Esta difere da eletrônica pois os processos não são mais realizados por meio de correntes elétricas, mas acontecem devido às interações entre os spins de uma rede [1]. O interesse no desenvolvimento de tecnologias baseadas em spintrônica advém das vantagens inerentes que esse sistema fornece em relação à eletrônica convencional tais como: eficiência energética, possibilidade de criação de memórias duráveis e velocidade de propagação de informação [2]. Contudo, ainda serão necessários mais trabalhos científicos teóricos e experimentais para que novos fenômenos sejam descobertos e suas aplicações sejam bem exploradas.

Uma das formas utilizadas para se propagar informação na spintrônica é a chamada corrente de spin. Como exemplo, temos a produção de correntes de elétrons polarizados com spins nos estados *up* e *down*, uma estratégia que resulta em correntes elétricas e de spins não nulas. Há também maneiras de se propagar informação em um sistema de rede de spin sem a utilização de correntes elétricas. É possível perturbar magneticamente uma amostra e produzir um desalinhamento dos spins que se propaga na rede, este fenômeno é conhecido como onda de spin e característico em isolantes magnéticos [3]. O fenômeno é análogo às ondas mecânicas em um sólido, e da mesma forma como ondas mecânicas são quantizadas (fônons), a quantização das ondas de spin é denominada de mágnon. Como veremos ao longo do texto, o mágnon representa a onda de spin de menor energia para um determinado comprimento de onda.

Caso redes cristalinas de átomos com propriedades magnéticas sejam empregadas para o desenvolvimento de dispositivos, será de grande interesse uma descrição quantitativa dos

fenômenos inerentes a esse sistema. Um tipo de fenômeno em especial é a dissipação das ondas de spin em redes magnéticas reais. Já previamente abordada na literatura [4], a dissipação de ondas de spin pode ser verificada experimentalmente ao se notar que as ondas de spin possuem um comprimento de propagação característico a cada tipo de rede magnética. A descrição teórica deste fenômeno geralmente é feita através do modelo fenomenológico descrito pela equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) para precessão do spin [5]. Por se tratar de um modelo fenomenológico na qual a relação com os constituintes microscópicos do sistema não é explicitada, existe a possibilidade da abordagem desse sistema do ponto de vista quântico. A motivação é que este tratamento possibilite ou facilite a descrição de outros fenômenos puramente quânticos que possam surgir ou ser explicados pela dissipação analisada deste ponto de vista.

A dissipação de ondas de spin acontece devido às interações entre mágnons com outros graus de liberdade do sistema. Em geral, modelos quânticos que descrevem ondas de spin, como a Hamiltoniana de Heisenberg, não são capazes de descrever a dissipação de ondas de spin. Isso ocorre pois estes modelos não levam em consideração interações de mágnons com outros graus de liberdade do sistema no qual a energia se difunde. A difusão da energia no sistema é o que causa a aparente dissipação de energia em um sistema quântico, ao levarmos em consideração somente para a parte magnética, nota-se uma diminuição da energia presente nas ondas de spin, pois esta se difunde para outras graus de liberdade do sistema, levando a uma diminuição da energia magnética, porém a energia total do sistema fechado permanece a mesma.

A análise de dissipação através da mecânica quântica está longe de ser uma tarefa simples, afinal todas as interações físicas que surgem na Hamiltoniana são oriundas de forças conservativas, o que aparentemente torna o tratamento de dissipação algo impossível. Porém duas estratégias se destacam na literatura para o tratamento da dissipação de energia de sistemas quânticos. Uma dessas abordagens foi introduzida por Caldeira e Leggett [6], cuja ideia foi inserir um sistema acoplado que possuísse mais graus de liberdade que o sistema original e atua como um reservatório térmico. Sendo assim, a medida que a energia se distribui pelo reservatório, é altamente improvável que ela retorne ao sistema original. Em alguns casos esse reservatório tem uma natureza puramente abstrata. Esse reservatório introduz renormalizações no modelo original que dão origem a dissipação no sistema. A vantagem dessa abordagem é

que o sistema virtual pode ser explicado como sendo uma forma de representar os graus de liberdade do sistema real não levados em consideração pelo modelo original, mais detalhes em [6]. Sabe-se desde os anos 60 que a meia vida de mágnons em amostras de granadas de ítrio-ferro (do inglês, YIG) é devido ao espalhamento entre três mágnons [7]. Interações deste tipo sugerem que o reservatório pode ser modelado como um reservatório de mágnons.

Uma segunda maneira de implementar dissipação em sistemas quânticos é a utilização de Hamiltonianas não-Hermitianas (HNN) cujo estudo e aplicação em modelos magnéticos é o tema deste trabalho. Como mostramos em [9], a não-Hermiticidade pode ser equivalente matematicamente a processos físicos como interação entre mágnons de um reservatório, porém neste trabalho apresentaremos apenas os resultados da aplicação deste modelo. A introdução de Hamiltonianas não-Hermitianas dá origem à uma generalização da mecânica quântica [8] na qual a natureza não-Hermitiana pode surgir de várias formas distintas. Neste trabalho focaremos na não-hermiticidade proveniente da adição de um termo complexo à Hamiltoniana que, para um sistema magnético, será suficiente para o surgimento da dissipação. Este termo complexo resulta em autovalores complexos para a Hamiltoniana que estão associados ao decaimento exponencial no tempo da energia do sistema. Dessa forma os autovalores complexos são um meio simples de se obter modelos dissipativos. A originalidade do trabalho está na aplicação das ideias aqui mencionadas para criar um modelo de dissipação de ondas de spin. Mais especificamente, mostramos neste trabalho como a adição de um termo não-Hermitiano em conjunto com a Hamiltoniana de Heisenberg é capaz de descrever dissipação de ondas de spin. No contexto de ressonância ferromagnética (FMR), o modelo descreve adequadamente a precessão da magnetização e relaxação da magnetização. Naturalmente em experimentos de FMR os estados coerentes se originam [10], e como consequência o surgimento destes estados neste modelo provê uma aproximação com a mecânica clássica.

Os estados coerentes são os estados quânticos mais clássicos possíveis pois provêm incerteza mínima entre pares de operadores canonicamente conjugados. Estes estados são eficazes na representação da precessão do campo de spin, induzida pela combinação de um campo estático e outro ressonante. Os estados coerentes foram descobertos por Schrödinger quando este procurava os estados quânticos capazes de minimizar a incerteza entre os operadores momento e posição no problema do oscilador harmônico. Posteriormente estados diretamente análogos à estes foram encontrados em muitos outros sistemas, em especial em sistemas óticos

e magnéticos. O estudo de estados coerentes hoje possui um lugar especial na física devido à multitude de sistemas que podem ser descritos através deles.

Na primeira parte o texto discutiremos uma revisão bibliográfica que irá introduzir ao leitor não familiarizado e relembrar o leitor instruído a fundamentação teórica do trabalho, tentaremos ser o tão auto contidos possível sem se estender demais. Em seguida apresentaremos a primeira parte original do trabalho, onde mostramos o desenvolvimento e resultados da utilização de Hamiltonianas não-Hermitianas para obter dissipação em redes cristalinas com propriedades magnéticas à temperatura zero. Na última parte do trabalho mostraremos como é possível aplicar a mesma técnica anterior no mesmo tipo de sistema, porém com esta a temperatura finita.

# Capítulo II

## Revisão Bibliográfica

Os temas mais relevantes para o desenvolvimento deste projeto serão discutidos de maneira introdutória neste capítulo. Abordaremos uma discussão sobre formalismos em mecânica quântica; as excitações em sistemas magnéticos conhecidas como mágnons; a termodinâmica dos estados coerentes; o tratamento de estados coerentes de mágnons em temperatura zero e finita; e por fim uma revisão da mecânica quântica não-Hermitiana.

### 2.1 Formalismos da mecânica quântica

Para o tratamento analítico de sistemas quânticos é comum a utilização das representações de Schrödinger e Heisenberg [11]. A representação de Schrödinger tem como principal característica a evolução temporal dos estados, ao passo que os operadores não possuem dinâmica temporal. A dinâmica de um estado  $|\Psi(t)\rangle$  é dada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle. \quad (2.1)$$

Sempre podemos representar a evolução temporal de um estado pelo operador evolução:

$$|\Psi(t)\rangle = T_t \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right) |\Psi_0\rangle = U(t, t_0) |\Psi_0\rangle, \quad (2.2)$$

em que  $T_t$  é o operador ordenamento temporal, capaz de ordenar os os operadores dependentes do tempo a sua frente dos primeiros intervalos de tempo para os ultimos.  $U$  é o operador de

evolução temporal.

Na representação de Heisenberg os estados não possuem dinâmica enquanto os operadores carregam a evolução temporal do sistema. A dinâmica dos operadores é governada pela equação de Heisenberg:

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), H] + \frac{\partial A_H(t)}{\partial t}. \quad (2.3)$$

A relação entre um operador na representação de Schrödinger ( $A_S$ ) e Heisenberg ( $A_H$ ) é dada por:

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0) A_S U(t, t_0), \quad (2.4)$$

As representações são equivalentes, ou seja, não introduzem informação alguma, apenas representam a mesma teoria de formas diferentes, justamente por isso chamadas de representações. Existe também uma terceira representação, onde tanto os operadores quanto os estados são dinâmicos. A motivação para uma representação deste tipo existe pois frequentemente a Hamiltoniana é composta de uma parte quadrática (com relação a operadores canonicamente conjugados ou operadores em segunda quantização) com solução exata e um potencial complicado. Neste caso, pode ser conveniente uma representação onde os operadores evoluam temporalmente com respeito apenas à parte quadrática, enquanto o estado captura a evolução temporal com respeito ao potencial. Este formalismo é chamado de formalismo de interação.

Como dito anteriormente, o formalismo de interação é especialmente útil quando a Hamiltoniana pode ser dividida em duas partes: uma parte livre  $H_0$  (simples de ser resolvida) e a interação  $V(t)$  (geralmente um potencial mais complicado dependente do tempo), ou seja:

$$H = H_0 + V(t). \quad (2.5)$$

Escrevemos o valor esperado de um operador  $A$  qualquer da seguinte forma:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle, \quad (2.6)$$

Podemos inserir convenientemente o operador identidade definido como:

$$\mathbb{I} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)}e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} \quad (2.7)$$

na equação (2.6) e utilizar a equação (2.2) para obtermos:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi(t) |_I \hat{A}(t) | \Psi(t) \rangle_I, \quad (2.8)$$

onde as seguintes definições foram feitas:

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} A e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)}, \quad (2.9)$$

$$| \Psi(t) \rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H dt'} | \psi_0 \rangle = S(t, t_0) | \psi_0 \rangle. \quad (2.10)$$

Daqui em diante reservaremos o circunflexo para denotar operadores no formalismo de interação. Na última equação o operador  $S$  é definido como o operador evolução no formalismo de interação. Derivando o operador  $S$  em relação ao tempo obtemos:

$$\frac{dS(t, t_0)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{V}(t) S(t, t_0), \quad S(t_0, t_0) = \mathbb{I}, \quad (2.11)$$

onde o operador  $\hat{V}$  é definido assim como na equação (2.9). Integrando essa equação no tempo obtemos a seguinte equação autoconsistente:

$$S(t, t_0) = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}(t') S(t', t_0) dt'. \quad (2.12)$$

Como  $S(t, t_0)$  trata-se de uma equação autoconsistente, podemos substituir o operador  $S$  no lado direito da equação pela própria equação (2.12). Iterando este processo repetidas vezes obtemos:

$$S(t, t_0) = T_t \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}(t') dt' \right), \quad (2.13)$$

onde o operador de ordenamento temporal  $T_t$  é adicionado para simetrizar os intervalos de integração no tempo. Como foi possível observar nas definições das equações (2.9) e (2.10), a maior característica do formalismo de interação é permitir que os operadores tenham a

dinâmica temporal dependente apenas da parte livre da Hamiltoniana, enquanto a evolução dos estados ocorre devido ao potencial.

## 2.2 Teoria da resposta linear

Essa seção descreve um método utilizado para obter funções respostas de um sistema em um regime linear, o formalismo aqui descrito permitirá o cálculo da suscetibilidade magnética como será mostrado mais adiante. Começaremos a discussão com a definição do regime de resposta linear de um sistema após ser perturbado [12]. Em geral, ao realizarmos um experimento, estamos perturbando um sistema, e o sistema geralmente altera suas propriedades por essa perturbação. Caso o objetivo seja o de caracterizar o material não perturbado, é desejado que essa perturbação seja pequena suficiente de modo que as alterações no sistema não perturbado sejam desprezíveis. Este é o regime da respsta linear.

Seguindo essa definição do regime da resposta linear vamos encontrar uma expressão para a função resposta linear de um sistema mediante a uma pequena perturbação causada. Qual fator linear da proporcionalidade entre a perturbação e o valor esperado de um operador qualquer? Para descobriremos isso, vamos expressar a Hamiltoniana de um sistema  $H_0$  incluindo a perturbação  $V(t)$  da qual queremos avaliar a resposta:

$$H = H_0 + V(t), \quad (2.14)$$

onde supomos que  $V(t) = -Bf(t)$ , no qual  $B$  é um operador e  $f(t)$  uma função dependente do tempo. Os valores esperados são de um operador  $A$  qualquer no formalismo de interação são dados por:

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t_0) | S^\dagger(t, t_0) \hat{A}(t) S(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle, \quad (2.15)$$

em que  $S(t, t_0)$  é dado pela equação (2.13). Podemos expandir o operador  $S(t, t_0)$  em primeira ordem e obter:

$$S(t, t_0) \approx \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}(t') dt'. \quad (2.16)$$

Substituindo o resultado acima no cálculo do valor esperado obtemos:

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{A}(t) | \psi(t_0) \rangle + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \psi(t_0) | [\hat{V}(t'), \hat{A}(t)] | \psi(t_0) \rangle dt', \quad (2.17)$$

Pode-se definir  $\Delta A(t) \equiv \langle A \rangle - \langle \psi(t_0) | \hat{A}(t) | \psi(t_0) \rangle$ . Vamos considerar o limite  $t_0 \rightarrow -\infty$ , utilizar a notação  $\langle \dots \rangle$  para denotar o valor esperado avaliado no estado inicial, e substituir  $V(t) = -Bf(t)$ . Assim:

$$\Delta A(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t-t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)] \rangle f(t') dt', \quad (2.18)$$

em que  $\theta(t-t')$  é a função degrau de Heaviside. Assim temos o resultado desejado. Expressa-se a proporcionalidade linear entre a perturbação e o valor esperado de um operador qualquer da seguinte forma:

$$\Delta A(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t-t') f(t') dt', \quad (2.19)$$

onde

$$\chi(t-t') = \theta(t-t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)] \rangle. \quad (2.20)$$

designa a susceptibilidade do operador  $A$  ao campo  $f(t)$ .

## 2.3 Hamiltoniana de Heisenberg

Os elétrons em um material se organizam em pares em um mesmo nível de energia devido ao seu diferente estado de spin. Alguns materiais são compostos de átomos no qual os elétrons da última camada não estão pareados. Em situações desse tipo, o átomo apresenta momento angular total não nulo e dessa forma o sistema exibe propriedades magnéticas. Mesmo sem a presença de um campo magnético externo, os materiais ditos ferromagnéticos apresentam magnetização. Esse efeito ocorre devido à interação de troca entre os elétrons. Como elétrons são férmions, é necessário que sua função de onda total, composta pela parte espacial e de spin, seja antissimétrica. A paridade da função de spin depende da orientação (alinhada

ou anti-alinhada) dos spins nos sítios de uma rede e, como a função de onda total deve ser antissimétrica, a orientação dos spins forçam uma simetria na função de onda espacial. Quando a interação entre elétrons é levada em consideração, uma análise perturbativa em primeira ordem (em um sistema de dois átomos, por exemplo) nos mostra que funções de onda espaciais com diferentes simetrias possuem diferentes energias. Isso nos leva a importante conclusão que mesmo quando a Hamiltoniana não depende do spin eletrônico, a energia dependerá.

Esta última afirmação levou vários pesquisadores a criarem modelos simplificados de interações eletrônicas em materiais, motivados certamente pela ideia que uma análise levando em consideração a Hamiltoniana completa de cristais é impossível. Um dos destes modelos é a Hamiltoniana de Heisenberg (HH) [12] que captura a ideia que a energia depende do alinhamento dos spins de diferentes sítios.

### 2.3.1 Interpretação física

Vamos detalhar a discussão realizada nos parágrafos anteriores explorando um sistema de dois átomos de hidrogênio. Suponhamos que dois átomos de hidrogênio sejam uma boa aproximação para átomos vizinhos em uma rede. Estes átomos interagem através do elétron desemparelhado na última camada eletrônica. Considerando a interação coulombiana de forma perturbativa, a correção da energia em primeira ordem é dada por:

$$\langle V \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3r_1 d^3r_2, \quad (2.21)$$

onde  $r_{12} = |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$  é a distância entre os elétrons 1 e 2. Ignoramos a parte da função de onda relacionada ao spin pois a energia de interação coulombiana não depende da mesma. Vamos colocar a função espacial em uma forma geral simétrica ou antissimétrica, lembrando que estamos na aproximação para qual os estados não perturbados de cada elétron são os estados usuais do átomo de hidrogênio:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \phi_\alpha(\vec{r}_1) \phi_\beta(\vec{r}_2) \pm \phi_\alpha(\vec{r}_2) \phi_\beta(\vec{r}_1) \right], \quad (2.22)$$

em que as letras gregas  $\alpha$  e  $\beta$  são índices para os elétrons. A função de onda espacial a ser escolhida será simétrica ou antissimétrica dependendo da simetria da função de spin destes

elétrons, afinal, pelo princípio de exclusão de Pauli, por serem férmions, elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico. Então ao substituirmos essa função de onda espacial na média da interação obtemos:

$$\langle V \rangle = E \pm J, \quad (2.23)$$

onde:

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2, \quad (2.24)$$

$$J = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2, \quad (2.25)$$

em que  $J$  é chamado de integral de troca. Como dito anteriormente, a escolha da função de onda espacial depende da função de spin, já que a função de onda total deve ser antissimétrica. Caso os elétrons estejam no estado singlete (spins antiparalelos), a função de onda de spin será antissimétrica, enquanto a função de onda espacial será simétrica. Assim, a média da energia será dada por  $V = E + J$ . Se obtivermos um estado tripleto (spins paralelos), o contrário acontece e a energia será  $V = E - J$ . Portanto, apesar da interação coulombiana não depender do estado de spin, a energia média certamente depende, como nota-se na figura 2.1. Podemos assim escrever a energia média em termos das variáveis de spin:

$$\langle V \rangle = E - J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (2.26)$$

$J$  é redefinido a menos de uma constante para que retornemos a expressão correta de  $\langle V \rangle$ . Redefinindo o estado fundamental de energia, podemos escrever a Hamiltoniana de uma rede cristalina ferromagnética na ausência de campos magnéticos externos e considerando apenas interações de troca entre primeiros vizinhos como:

$$H_{FM} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.27)$$

onde os índices denotam os primeiros vizinhos em uma rede cristalina. Caso a rede fosse antiferromagnética, o sinal negativo na da equação (2.27) tornaria-se positivo. Em caso de átomos de muitos elétrons o vetor  $\vec{S}$  na Hamiltoniana representa o momento angular total do

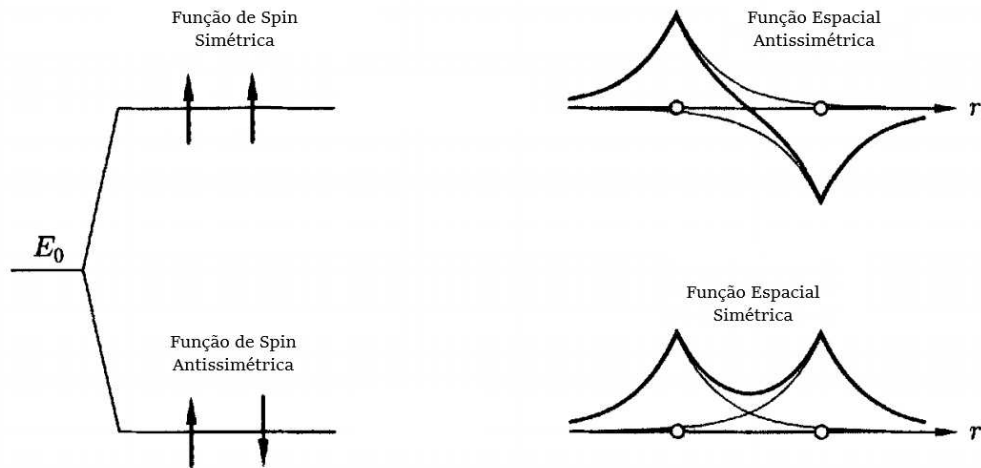


Figura 2.1: Analisando perturbativamente a interação entre elétrons em um sistema de dois átomos é possível verificar que funções espaciais antissimétricas possuem maior energia do que funções de onda espaciais simétricas. A simetria da função espacial é determinada pela simetria da função de spin, sendo assim a energia do sistema depende da orientação dos spins em cada átomo.

átomo. O valor de  $J$  na equação (2.27) não é exatamente o mesmo que a integral de troca em um tratamento mais cuidadoso, ele depende na verdade do grau de superposição dos estados e do valor de  $E$ , estes valores determinam também o sinal de  $J$ .

A equação (2.27) será a Hamiltoniana base para os estudos de ondas de spin apresentados neste trabalho. Além disso, serão adicionados termos de interação dos spin com campos magnéticos externos.

### 2.3.2 Demonstração formal

Agora vamos demonstrar o surgimento da Hamiltoniana de Heisenberg de uma forma adequada à física de materiais. Uma introdução completa ao assunto necessitaria de muitas páginas, portanto resumiremos a demonstração a fim de mostrar os principais pontos da mesma, lembrando o leitor instruído e instigando o leitor não familiarizado a consultar a referência [35]. Para isso, um sólido cristalino será representado por um gás de elétrons com interação coulombiana entre os elétrons:

$$H = \sum_l^N \frac{P_l^2}{2m} + H_{int}, \quad (2.28)$$

em que  $N$  é o número de elétrons livres e também de sítios. Escrevendo a interação entre elétrons em termos de operadores de criação e aniquilação e usando a base das funções de Wannier<sup>1</sup> dadas por  $|\vec{R}_l\rangle$ , temos:

$$H_{int} = \sum_{l,l',l'',l''',\sigma,\sigma'} \langle \vec{R}_l \vec{R}_{l'} | U | \vec{R}_{l''} \vec{R}_{l'''} \rangle c_{l\sigma}^\dagger c_{l'\sigma'}^\dagger c_{l''\sigma} c_{l'''\sigma'}, \quad (2.29)$$

no qual  $\sigma$  são índices de spin. Podemos introduzir uma aproximação que, embora descarecterize o sistema, retenha o comportamento magnético do mesmo. Essa aproximação supõe que os elétrons não mudam de posição após a interação, isso é o mesmo que dizer que  $\vec{R}_l = \vec{R}_{l''}$  e  $\vec{R}_{l'} = \vec{R}_{l'''}$  (deve se somar separadamente o caso em que  $\vec{R}_l = \vec{R}_{l''}$  e  $\vec{R}_{l'} = \vec{R}_{l'''}$ ). Além disso, ao identificarmos um ordenamento de operadores que obedecem à álgebra SU(2), podemos fazer a substituição dos mesmos por operadores de spin:

$$S_l^z = \frac{1}{2} [c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} - c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow}] \quad (2.30)$$

$$S_l^+ = c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\downarrow}, \quad S_l^- = c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\uparrow}. \quad (2.31)$$

Esta representação é conhecida como representação fermiônica de Abrikosov [13] e requer um vínculo local dado por  $\sum_{\sigma} c_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma} = 2S$ . Após ambas considerações é possível mostrar que:

$$H_{int} = V_0 - \sum_{i,j} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.32)$$

sendo  $V_0 = -\sum_{i,j} \langle \vec{R}_i \vec{R}_j | U | \vec{R}_j \vec{R}_i \rangle$  e  $J_{i,j} = 4 \langle \vec{R}_i \vec{R}_j | U | \vec{R}_j \vec{R}_i \rangle$  a integral de troca. Considerando  $J$  constante obtemos a equação (2.27).

## 2.4 Mágnons e ondas de spin

Aqui discutiremos sistemas cristalinos chamados de ferromagnetos, bem como suas excitações, as denominadas ondas de spin, a quantização dessa excitação é denominada de mágnon.

Em um sólido cristalino é possível estudar as propriedades magnéticas através da Hamil-

<sup>1</sup>As funções de Wannier são um conjunto completo e ortornormal de funções de onda. No caso de uma rede de um cristal, a ortonormalidade permite uma base conveniente para representação de estados eletrônicos em certos regimes.

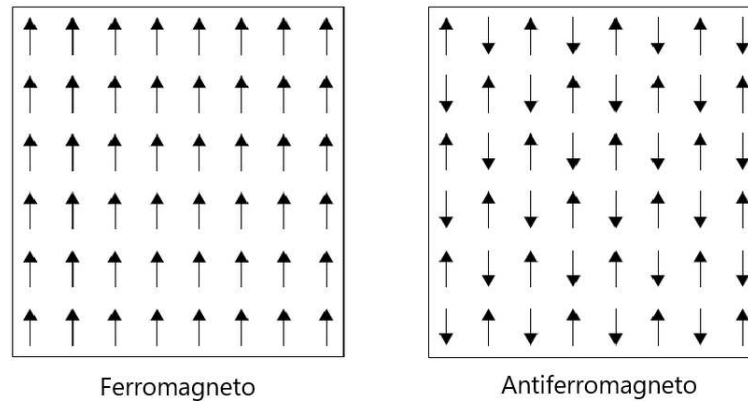


Figura 2.2: Esquematização da orientação dos spins em uma rede de spins em duas amostras de materiais. O estado representado é o estado fundamental da rede para um modelo clássico.

toniana de Heisenberg. Este modelo descreve duas situações dependendo do valor da integral de troca (supondo mesmo valor em todos os sítios), se o valor for positivo, o modelo descreve os ferromagnetos. Caso negativo, descreve os antiferromagnetos. Do ponto de vista clássico, os antiferromagnetos possuem um estado fundamental caracterizado pelo anti-paralelo dos pares de spin da rede, enquanto os ferromagnetos se caracterizam pelo estado fundamental composto por todos spins paralelos, veja figura (2.2). Estamos interessados neste trabalho nos ferromagnetos.

Um dos interesses da física de estado sólido é estudar as excitações de mais baixa energia de um sistema. Estas excitações são dominantes quando o sistema está a baixas temperaturas, portanto, outros graus de liberdade do sistema (não relacionados com essa excitação) podem ser ignorados. Referem-se a estes graus como graus de liberdade congelados.

Os mágnons são um desalinhamento coletivo dos spins, de forma com que a penalidade da energia de troca associada ao desalinhamento de um spin é distribuída ao longo de muitos sítios, como pode ser visto na figura (2.3). Estas excitações caracterizam a onda de spin, e são as excitações dominantes no regime de baixas energias. Pode-se pensar que em um ferromagneto, por exemplo, a excitação de energia mais baixa fosse um spin de único sítio anti-paralelo com campo externo. Um raciocínio simples nos mostra que isso não é verdade, pensemos em um mágnon de momento nulo, ou seja, comprimento de onda muito longo. Esta excitação faz a amostra inteira girar coletivamente, mudando o alinhamento de todos os spins da rede ao mesmo tempo. Como a direção relativa de spins vizinhos não muda,

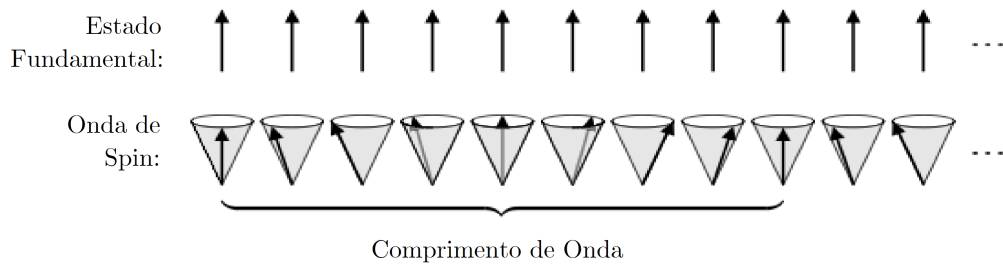


Figura 2.3: No estado fundamental de um ferromagneto todos os spins apontam na mesma direção. Os estados de mais baixa energia acima do estado fundamental são as ondas de spin na qual os spins precessam em torno da direção de ordenamento. Uma onda de spin de longo comprimento de onda carrega pouca (com relação a outras excitações) energia, pois a diferença na direção de spins vizinhos é bem pequena.

este estado tem mesma energia do estado fundamental, portanto, um mágnon de momento nulo é a excitação de mais baixa energia. Isso reflete o fato de que o estado fundamental de um ferromagneto é infinitamente degenerado para todas as infinitas possíveis direção de alinhamento. Já um spin de um único sítio corresponde a um conjunto de mágnons altamente energéticos, sendo assim uma excitação de mais alta energia.

### 2.4.1 Relação de dispersão

Uma descrição formal das ondas de spin, dentro da teoria quântica, pode ser obtida através da Hamiltoniana de Heisenberg. Estudaremos a situação de um ferromagneto imerso em um campo estático e uniforme, considerando apenas interações entre primeiros vizinhos e considerando a integral de troca independente dos sítios:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - g\mu_B B^z \sum_i S_i^z, \quad (2.33)$$

onde  $g$  é o fator- $g$  de Landé,  $\mu_B$  é o magneton de Bohr e  $B^z$  é a intensidade do campo magnético estático em cada sítio. É típico nesse momento utilizarmos uma representação dos operadores de spin que mapeia os operadores de spin em operadores bosônicos. Schwinger foi o primeiro a demonstrar que é possível existir um mapeamento entre operadores de momento angular e operadores de criação e destruição [14]. Posteriormente, Arovás e Auerbach

aplicaram estas ideias para representação de operadores de spin [15], da seguinte forma:

$$S_l^z = \frac{1}{2} \left[ a_{l\uparrow}^\dagger a_{l\uparrow} - a_{l\downarrow}^\dagger a_{l\downarrow} \right] \quad (2.34)$$

$$S_l^+ = a_{l\uparrow}^\dagger a_{l\downarrow}, \quad S_l^- = a_{l\downarrow}^\dagger a_{l\uparrow}, \quad (2.35)$$

em que  $\sum_\sigma a_{\sigma i}^\dagger a_{\sigma i} = 2S$ . O motivo pelo qual se troca de operadores fermiônicos na representação de Abrikosov para operadores bosônicos na representação de Schwinger está ligado na facilidade em se trabalhar com bósons em relação a férmions. Alguns autores foram capazes de mostrar que ambas representações levam a resultados iguais [16].

Anteriormente a Schwinger, Holstein e Primakoff [17] encontraram uma forma de representar as componentes de spin em termos de operadores de criação e aniquilação. A representação de Holstein-Primakoff funciona como uma aproximação da representação de Schwinger no limite em que  $S^z$  é muito maior que as demais componentes do spin. Essa representação faz com que o vínculo  $\sum_\sigma a_{\sigma i}^\dagger a_{\sigma i} = 2S$  seja atendido através da substituição aparentemente ingênua:

$$a_{l\downarrow} \rightarrow \sqrt{2S - a_{l\uparrow}^\dagger a_{l\uparrow}} \quad (2.36)$$

isso faz com que o vínculo seja satisfeito automaticamente, e dessa forma temos (abandonando o índice de spin):

$$S^+ = \left( \sqrt{2S - a^\dagger a} \right) a \quad (2.37a)$$

$$S^- = a^\dagger \left( \sqrt{2S - a^\dagger a} \right) \quad (2.37b)$$

$$S^z = S - a^\dagger a, \quad (2.37c)$$

lembrando que  $S^x = \frac{1}{2}(S^+ + S^-)$  e  $S^y = \frac{1}{2i}(S^+ - S^-)$ . Para facilitar o desenvolvimento podemos aproximar as raízes na forma  $\sqrt{1 - \xi} \approx 1 - \frac{\xi}{2}$ . Mantendo apenas os termos de ordem zero na expansão da raiz, as equações (2.37) se tornam:

$$S_i^+ = \sqrt{2S} a_i, \quad S_i^- = \sqrt{2S} a_i^\dagger, \quad S_i^z = S - a_i^\dagger a_i. \quad (2.38)$$

Os termos de maior ordem estão relacionados à interações entre mágnons e serão desprezados aqui. Utilizaremos a representação (2.38) na Hamiltoniana (2.33). Para diagonalizarmos

a Hamiltoniana, vamos introduzir uma mudança de base para o espaço dos momentos através das transformadas de Fourier discretas dadas por:

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} a_q, \quad a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} a_q^\dagger. \quad (2.39)$$

Assim após a substituição da representação e a aplicação das transformadas obtemos:

$$H = E_0 + H_1, \quad (2.40)$$

adotando  $\hbar = 1$ , temos  $E_0 = -JNzS^2 - g\mu_B B^z S$  e  $H_1$  dado por:

$$H_1 = \sum_q \omega_q a_q^\dagger a_q \quad \text{com} \quad \omega_q = 2JzS(1 - \gamma_q) + g\mu_B B^z. \quad (2.41)$$

Na equação acima  $\gamma_q$  é chamado de fator de estrutura, sendo dado por:

$$\gamma_q = \frac{1}{z} \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{\delta}} \approx 1 - \frac{1}{2z} \sum_{\vec{\delta}} (\vec{q}\cdot\vec{\delta})^2, \quad (2.42)$$

onde  $\vec{\delta} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ ,  $z$  é o número de vizinhos para um dado sítio da rede. Consideramos também que a aproximação de longos comprimentos de onda  $|\vec{q}\cdot\vec{\delta}| \ll 1$  foi adotada. A suposição que o cristal em questão é isotrópico foi usada para concluir que  $\gamma_q = \gamma_{-q}$ . É possível mostrar que para uma rede cúbica simples  $\sum_{\vec{\delta}} (\vec{q}\cdot\vec{\delta})^2 = 2(qa)^2$ . Isso nos leva finalmente ao resultado:

$$\omega_q = g\mu_B B^z + Kq^2. \quad (2.43)$$

em que  $K = 2JSa^2$  é chamada de constante de rigidez de spin.

## 2.4.2 Capacidade térmica atribuída aos mágnons

Com a Hamiltoniana diagonalizada estamos em condição de calcular quantidades termodinâmicas relevantes como capacidade térmica. Para isso vamos calcular a energia de um gás

bosônico de mágnons:

$$E = E_0 + \sum_q \omega_q \langle a_q^\dagger a_q \rangle = E_0 + \sum_q \omega_q n_B(\omega_q), \quad (2.44)$$

em que  $n_B$  é a distribuição de Bose-Einstein. O cálculo pode ser feito no limite termodinâmico em que o número de sítios tende ao infinito e o vetor de onda se torna muito pequeno. Prosseguindo com o campo externo nulo, obtemos:

$$E = E_0 + \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{q_{max}} K q^2 n_B(\omega_q) d^3 q \approx E_0 + \frac{0,045}{\beta^{\frac{5}{2}} K^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.45)$$

Finalmente podemos calcular a capacidade térmica:

$$c_V = \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_V = 0,113 k_B \left( \frac{k_B T}{K} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (2.46)$$

obtendo assim a característica contribuição de mágnons a capacidade térmica do tipo  $T^{\frac{3}{2}}$ .

### 2.4.3 Temperatura de ordenamento

Para obter a temperatura máxima no qual ocorre o ordenamento espontâneo dos spins devemos calcular a magnetização. Esta é definida como a média térmica da soma da componente de spin paralela ao campo externo:

$$\begin{aligned} \langle M(T) \rangle &= g\mu_B \sum_i \langle S_i^z \rangle = g\mu_B \left( NS - \sum_i \langle a_i^\dagger a_i \rangle \right) = \\ &= g\mu_B \left( NS - \sum_k \langle a_k^\dagger a_k \rangle \right) = g\mu_B \left( NS - \sum_k n_B(\omega_k) \right), \end{aligned} \quad (2.47)$$

em que foi utilizada a representação de  $S_i^z$  dada em (2.37c) e a transformada de Fourier discreta nos operadores. Podemos determinar o efeito da temperatura na magnetização calculando  $\Delta M = M(0) - M(T)$ , com  $M(0) = g\mu_B SN$  sendo a magnetização máxima obtida em temperatura zero, assim:

$$\Delta M = g\mu_B \sum_k n_B(\omega_k) = \frac{g\mu_B}{(2\pi)^3} \int_0^{q_{max}} n_B(\omega_q) d^3 q \approx 0,117 g\mu_B \left( \frac{k_B T}{K} \right)^{\frac{3}{2}}. \quad (2.48)$$

É possível notar que o resultado acima reproduz corretamente o típico comportamento de dependência da magnetização com a temperatura da forma  $T^{\frac{3}{2}}$ , conhecida como lei de Bloch. Podemos reescrever a última equação na forma:

$$M(T) = M(0) \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \right], \quad \text{com} \quad T_c = \left( \frac{M(0)}{0,117 k_B g \mu_B} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{K}{k_B}, \quad (2.49)$$

em que  $T_c$  é a conhecida temperatura de ordenamento (ou de Curie), temperatura na qual a magnetização é destruída devido ao alto grau de desordenamento dos spins.

## 2.5 Estados coerentes

A diferença entre mecânica clássica e quântica é clara, porém em que limite um sistema quântico torna-se clássico? Poderíamos nos perguntar qual é o estado quântico mais próximo possível de um sistema clássico. Dito de outra forma, procuramos os estados que minimizam a incerteza e ao encontrar tais estados somos levados à uma maneira muito natural de adotar o limite clássico em sistemas quânticos. Esta construção matemática difere do teorema de Ehrenfest, pois ela estuda os estados ainda quânticos mais próximos de um regime clássico. Porém o teorema de Ehrenfest continua a fornecer um aparato matemático para a abordagem do princípio da correspondência, mesmo na construção dos estados coerentes.

A busca pelos estados coerentes começaram com Schrödinger que procurava os estados que minimizassem a incerteza entre pares de operadores canônicos conjugados, como momento e posição, no problema do oscilador harmônico quântico. Posteriormente, Glauber [18], trabalhando em sistemas óticos, utilizou a notação de multi-estados de fótons para caracterizar o estados coerentes do campo eletromagnético como sendo os autoestados do operador de aniquilação. Matematicamente, Glauber obteve os mesmos estados que Schrödinger. Schwinger formalizou essa construção que, devido ao trabalho de Glauber, ficou conhecida como estados coerentes. O desenvolvimento destes estados se mostrou extremamente útil para física do estado sólido, como ficará claro na próxima sessão sobre estados coerentes de mágnons.

É possível mostrar que estados coerentes são os estados que minimizam a incerteza entre

os operadores de momento e posição do sistema:

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \quad (2.50)$$

em que  $p$  e  $x$  são combinações lineares de operadores de criação e destruição. A construção dos estados coerentes é utilizada em muitas aplicações da física quântica, especialmente no formalismo de integrais de caminho e também quando se deseja estabelecer mais facilmente uma conexão com o caso análogo clássico de um sistema.

Os estados coerentes são definidos como os autoestados do operador de aniquilação:

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad (2.51)$$

onde  $a$  é o operador de aniquilação bosônico e  $|\alpha\rangle$  o autoestado coerente associado ao autovalor  $\alpha$ . Poderíamos fazer uma demonstração que leva em conta um espaço de Fock<sup>2</sup> com muitos estados, porém como os operadores de criação e destruição de diferentes estados comutam entre si, podemos fazer a demonstração para o estado do espaço de Fock de um único estado. O caso geral [19] torna-se apenas uma trivial generalização sobrecarregada de somatórios, produtórios e índices.

Naturalmente, é de se esperar que os estados coerentes serão convenientemente representados em uma combinação linear de vetores do espaço de Fock:

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad (2.52)$$

Utilizando a equação (2.52) e o fato que  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ , obtemos a seguinte relação:

$$\alpha c_{n-1} = \sqrt{n} c_n. \quad (2.53)$$

A expressão acima nos leva à uma relação de recursão para o termo  $c_n$ . Se continuarmos

---

<sup>2</sup>O espaço de Fock é um construto algébrico usado em mecânica quântica para construir espaços de estados quânticos de uma variável ou número indefinido de partículas idênticas através do espaço de Hilbert de uma única partícula.

essa recursão obteremos:

$$c_n = c_0 \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}. \quad (2.54)$$

Por outro lado, os estados de ocupação sempre podem ser representados pela repetida aplicação dos operadores de criação no estado de ocupação nulo:

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (2.55)$$

Unindo as equações (2.54) e (2.55) com a equação (2.52), obtemos a representação dos estados coerentes:

$$|\alpha\rangle = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a^\dagger \alpha)^n}{n!} |0\rangle = c_0 \exp(a^\dagger \alpha) |0\rangle. \quad (2.56)$$

Por questões de normalização, escolhemos  $c_0 = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}$ . A fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff (BCH), que nos mostra como unir exponenciais de operadores  $A$  e  $B$  distintos, é dada por (no caso especial onde os operadores  $A$  e  $B$  comutam com o comutador de ambos.):

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{[A,B]}. \quad (2.57)$$

Por meio da fórmula de BCH podemos concluir que:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp(a^\dagger \alpha) \exp(-a \alpha^*) |0\rangle \\ &= \exp(a^\dagger \alpha - \alpha^* a) |0\rangle. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Definimos o operador deslocamento  $D(\alpha)$  como:

$$D(\alpha) = e^{a^\dagger \alpha - \alpha^* a}. \quad (2.59)$$

A expressão dos estados coerentes em termos dos estados do espaço de Fock é dada por:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (2.60)$$

O operador deslocamento possui uma série de propriedades, algumas destas propriedades são triviais de serem demonstradas. Entre essas podemos citar o fato que  $D(\alpha)$  é um operador unitário ( $D^\dagger(\alpha)D(\alpha) = \mathbb{I}$ ) que obedece:

$$D^\dagger(\alpha)aD(\alpha) = a + \alpha, \quad (2.61a)$$

$$D(\alpha)a^\dagger D^\dagger(\alpha) = a^\dagger - \alpha, \quad (2.61b)$$

$$D^\dagger(\alpha) = D(-\alpha), \quad (2.61c)$$

$$D(\alpha)D(\beta) = e^{\frac{1}{2}(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta)} D(\alpha + \beta), \quad (2.61d)$$

onde a última relação pode ser demonstrada usando a equação de BCH. A relação (2.61a) é a razão pelo nome do operador  $D(\alpha)$ . Os valores esperados mais relevantes são dados por:

$$\langle \alpha | a | \alpha \rangle = \alpha, \quad (2.62a)$$

$$\langle \alpha | a^\dagger | \alpha \rangle = \alpha^*, \quad (2.62b)$$

$$\langle n \rangle = \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = |\alpha|^2. \quad (2.62c)$$

Devemos nos lembrar que a notação  $|\alpha\rangle$  não se refere à um estado de Fock. Por exemplo,  $|1\rangle$  para  $\alpha = 1$  não deve ser confundido com o estado de ocupação  $|1\rangle$  em que  $n = 1$ . Devemos sempre recorrer a equação (2.60) para interpretarmos  $|\alpha\rangle$  em termos dos estados número. Os resultados aqui obtidos são todos para estados coerentes em temperatura nula.

Os estados coerentes são estados completos que obedecem:

$$\mathbb{I} = \frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha, \quad (2.63)$$

em que  $d^2\alpha = d\text{Re}(\alpha)d\text{Im}(\alpha)$  e a integral é realizada em todo plano complexo. A demonstração desse último resultado pode ser feita representando os estados coerentes em termos de estados do espaço de Fock. Usando a relação (2.60), obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha &= \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} |n\rangle \langle m| \int e^{-|\alpha|^2} \frac{(\alpha)^n (\alpha^*)^m}{\sqrt{m!} \sqrt{n!}} d^2\alpha \\ &= \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{|n\rangle \langle m|}{\sqrt{m!} \sqrt{n!}} \int_0^{\infty} e^{-r^2} r^{n+m+1} dr \int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\theta} d\theta, \end{aligned} \quad (2.64)$$

como:

$$\int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\theta} d\theta = 2\pi\delta_{n,m}, \quad \text{e} \quad \int_0^\infty e^{-r^2} 2r^{2n+1} dr = n!, \quad (2.65)$$

concluimos:

$$\frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = 1. \quad (2.66)$$

Com a relação acima é possível obter um estado do espaço de Fock como combinação de estados coerentes:

$$|n\rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|n\rangle = \int \frac{d^2\alpha}{\pi} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \frac{(\alpha)^n}{\sqrt{n!}} |\alpha\rangle. \quad (2.67)$$

A relação acima será utilizada no capítulo IV.

### 2.5.1 Estados coerentes térmicos

Discutiremos aqui os estados coerentes térmicos [20], também conhecidos como estados número deslocados, e suas propriedades mais relevantes para este trabalho. Eles são definidos como a aplicação de um operador deslocamento em um estado número excitado:

$$D(\alpha)|n\rangle = |n, \alpha\rangle = \frac{(a^\dagger - \alpha^*)^n}{\sqrt{n!}} |\alpha\rangle, \quad (2.68)$$

no qual a última relação pode facilmente ser demonstrada através da permutação sucessiva do operadores deslocamento com os operadores de criação que atuam sobre o estado de vácuo para gerar o estado número. As propriedades do operador deslocamento nos levam à conclusão de que:

$$a|n, \alpha\rangle = \sqrt{n}|n-1, \alpha\rangle + \alpha|n, \alpha\rangle, \quad (2.69)$$

$$a^\dagger|n, \alpha\rangle = \sqrt{n+1}|n+1, \alpha\rangle + \alpha^*|n, \alpha\rangle, \quad (2.70)$$

$$\langle n, \alpha|a^\dagger a|n, \alpha\rangle = n - |\alpha|^2. \quad (2.71)$$

Além disso é possível mostrar que  $\langle n, \alpha|k, \alpha\rangle = \delta_{k,n}$ . Estas últimas relações serão utilizadas

quando discutirmos a termodinâmica dos estados coerentes de mágnons.

### 2.5.2 Estados quânticos macroscópicos e estados coerentes

Um estado coerente é um tipo de estado quântico macroscópico (EQM). EQMs ocorrem quando correlações quânticas se estendem por distâncias muito maiores que o comprimento de onda característico. Nesse caso, uma região macroscópica pode ser descrita por um único estado quântico. Uma das maneiras de se definir EQMs é através do grau de superposição de estados espacialmente afastados, i.e.  $\langle A_i A_j \rangle$  em que  $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \rightarrow \infty$ . Esse cálculo é conhecido como ordem de longo alcance fora da diagonal (do inglês *Off-Diagonal Long Ranged Order*, *ODLRO*). Mais especificamente, o cálculo da *ODLRO* constitui uma verificação que o sistema se encontra em um EQM. A *ODLRO* pode ser entendida então como uma medida do grau de coerência de um sistema. Esta maneira de se estudar graus de coerência foi proposta pela primeira vez por O. Penrose durante o estudo da condensação de Bose-Einstein no He II [21, 22]. A condensação de Bose-Einstein constitui um dos mais simples sistemas com *ODLRO*.

Para mostrar como estados coerentes de fato possuem *ODLRO* e são um tipo de EQM, faremos o cálculo da matriz densidade não-local, definida em detalhes em [23]:

$$\rho(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \langle a^\dagger(\vec{r}_1) a(\vec{r}_2) \rangle = \frac{1}{N} \sum_q e^{-i\vec{q}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \langle a_q^\dagger a_q \rangle, \quad (2.72)$$

onde utilizamos a transformada de Fourier para representar o lado direito da equação. Podemos notar que  $\langle a_q^\dagger a_q \rangle$  nada mais é do que o valor esperado do operador número no espaço de Fourier, para o caso de estados coerentes  $n_q = |\alpha_q|^2$  (em temperatura nula). Tipicamente estaremos interessados em estados quânticos onde apenas um dos  $q$ -ésimos estados está ocupado (geralmente, mas nem sempre,  $q = 0$ ) e todos os outros números de ocupação são muito pequenos. Então, supondo que o estado  $q = 0$  tem número de ocupação  $|\alpha_0|^2 = N_0$ , onde  $N_0$  é um número da mesma ordem de grandeza do total de modos  $N$ , sendo assim escrevemos:

$$n_q = N_0 \delta_{q0} + f(q), \quad (2.73)$$

em que  $f(q)$  é uma função bem comportada. Sendo assim, substituindo o somatório por uma

integral sobre a primeira zona de Brillouin, temos:

$$\rho(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = n_0 + \int e^{-i\vec{q}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} f(q) d^3q, \quad (2.74)$$

em que  $n_0 = \frac{N_0}{N} \approx 1$ . Podemos notar que se  $f(q)$  for suficientemente bem comportada, sua transformada de Fourier será nula. Sendo assim, ao tomarmos o limite  $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rightarrow \infty$ , obtemos:

$$\lim_{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rightarrow \infty} \rho(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = n_0. \quad (2.75)$$

Concluimos então que um sistema descrito por um estado coerente possui de fato *ODLRO*, afinal o grau de superposição de estados espacialmente distantes é finito, não importando a distância.

## 2.6 Estados coerentes de mágnons

Nesta seção será abordada a Hamiltoniana base de um sistema sobre o qual discutiremos dissipação. Porém nesta seção será discutido apenas a descrição matemática por trás dos estados coerentes de mágnons. Para que se criem estados coerentes de mágnons é necessário a aplicação de um campo magnético estático e um campo oscilante (na faixa de microondas) na direção perpendicular ao plano da amostra [24]. O processo em questão é denominado ressonância ferromagnética (FMR, em inglês *ferromagnetic resonance*). Essa construção experimental é de grande utilidade para estudar propriedades ordenadas de sistemas magnéticos como: ressonância, corrente de spin, entre outros. Neste caso, os spins do material são excitados para que fiquem alinhados (devido ao campo estático) enquanto precessionam em fase (devido ao campo oscilante). Uma esquematização do experimento é mostrada na figura (2.4). Como mostrado nos trabalhos de Rezende e Zaguri [25, 26, 10], estados coerentes de mágnons podem explicar a precessão da magnetização e posteriormente foram importantes para o estudo da condensação de Bose-Einstein de mágnons [27, 28]

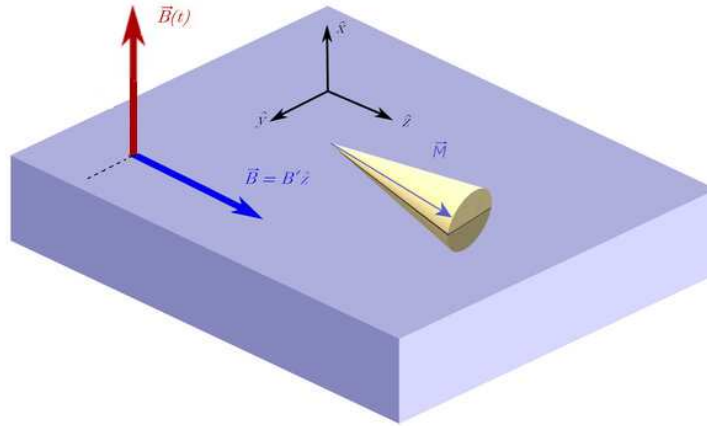


Figura 2.4: Um ferromagneto imerso no campo estático (azul marinho) e em um campo oscilante (vermelho). Magnetização (roxo) do material precessiona, como veremos adiante.

### 2.6.1 A origem dos estados coerentes

A Hamiltoniana que descreve o sistema que referimos na subseção anterior é a Hamiltoniana de Heisenberg abordada na equação (2.27) com a adição de um campo estático na direção  $z$  e de um campo dinâmico na direção  $x$ . Assim a Hamiltoniana toma a forma:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - g\mu_B B^z \sum_i S_i^z - g\mu_B \sum_i B_i(t) S_i^x, \quad (2.76)$$

onde  $B$  e  $B_i(t)$  são as intensidades dos campos magnéticos estático e dinâmico em cada sítio, respectivamente. O tratamento deste problema é exatamente o mesmo que foi feito na seção (2.1) com a adição da transformada de Fourier para o campo oscilante  $B_i(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} B_q(t)$ . Assim obtemos de forma idêntica a equação (2.40):

$$H = E_0 + H_1 - g\mu_B \frac{\sqrt{2S}}{2} \sum_q B_q(t) (a_q + a_q^\dagger) \quad (2.77)$$

com  $H_1$  dado por:

$$H_1 = \sum_q \hbar\omega_q a_q^\dagger a_q, \quad \text{com } \hbar\omega_q = 2JzS(1 - \gamma_q) + g\mu_B B^z. \quad (2.78)$$

Nesta etapa a parte estática da Hamiltoniana está diagonalizada mas o termo de interação

com o campo dinâmico não. Esta é uma das situações para as quais a utilização do formalismo de interação é adequada. Seguindo a equação (2.5), teremos:

$$\hat{H}_0 = E_0 + \hat{H}_1 \quad \text{e} \quad \hat{V}(t) = -g\mu_B \frac{\sqrt{2S}}{2} \sum_q B_q(t) (\hat{a}_q + \hat{a}_q^\dagger). \quad (2.79)$$

Dessa forma, calculamos a evolução temporal dos operadores de criação e aniquilação através da equação de Heisenberg:

$$\hat{a}(t) = a_q(0)e^{-i\omega_q t} \quad \text{e} \quad \hat{a}_q^\dagger(t) = a_q^\dagger(0)e^{i\omega_q t}. \quad (2.80)$$

Além disso, o operador evolução temporal no formalismo de interação é dado conforme a equação (2.9):

$$S(t) = T_t \exp \left[ \frac{ig\mu_B \sqrt{2S}}{2\hbar} \int_{t_0}^t \sum_q B_q(t') \left( a_q(0)e^{-i\omega_q t'} + a_q^\dagger(0)e^{i\omega_q t'} \right) dt' \right]. \quad (2.81)$$

Vamos reescrever a equação (2.81) da seguinte forma:

$$S(t) = T_t \exp \left[ \sum_q \alpha_q a_q^\dagger - \alpha_q^* a_q \right], \quad (2.82)$$

com  $\alpha_q$  definido por:

$$\alpha_q = \frac{ig\mu_B \sqrt{2S}}{2\hbar} \int_{t_0}^t B_q(t') e^{i\omega_q t'} dt'. \quad (2.83)$$

Podemos notar a semelhança entre as equações (2.82) e (2.59), com a exceção do operador de ordenamento temporal, elas são idênticas. É possível mostrar, através da equação (2.61d), que a eliminação do operador  $T_t$  em  $S(t)$  resulta apenas em uma fase global irrelevante  $\Phi$ . Nesse caso  $S(t)$  é escrito como  $S(t) = e^{i\Phi} D(\alpha)$ , onde:

$$D(\alpha) = D(\alpha_{q_1}) \dots D(\alpha_{q_N}) = \exp \left( \sum_q \alpha_q a_q^\dagger - \alpha_q^* a_q \right), \quad (2.84)$$

é o operador deslocamento. Operadores deslocamentos de diferentes números de onda podem ser unidos na última expressão devido ao fato que os operadores de diferentes números de

onda comutam entre si. Podemos utilizar o formalismo de interação para calcular valores esperados desse sistema. Normalmente deveríamos fazer um estudo estatístico onde as médias seriam térmicas e o operador de evolução atuaria em um estado excitado de mágnons, porém deixaremos esse caso em temperatura finita para a próxima seção. Aqui vamos supor que o sistema se encontra em baixíssimas temperaturas ( $T \approx 0$ ) de modo que seu estado inicial, antes da ativação do campo dinâmico, é, como boa aproximação, o estado fundamental dos mágnons  $|0\rangle$ .

Em geral a física do estado sólido se interessa por cálculos em baixíssimas temperaturas, onde as excitações de baixas energias ocorrem. Estas excitações são características das Hamiltonianas em física da matéria condensada, e se tornam as únicas excitações energeticamente relevantes neste regime de baixas temperaturas.

A atuação do operador evolução temporal no estado inicial é dada por:

$$D(\alpha)|0\rangle = D(\alpha_{q_1})\dots D(\alpha_{q_N})|0, \dots, 0\rangle = |\alpha_{q_1}, \dots, \alpha_{q_N}\rangle = |\alpha\rangle. \quad (2.85)$$

Daqui em diante o desenvolvimento será realizado com foco apenas em um número de onda já que os operadores comutam entre si. A última equação nos mostra que a aplicação do campo oscilante no ferromagneto dá origem aos estados coerentes de mágnons. O cálculo de valores esperados de um operador  $A$  é dado por:

$$\langle A \rangle = \langle \alpha | A | \alpha \rangle. \quad (2.86)$$

Como já vimos nas relações (2.38) os valores esperados de spin são escritos em termos de operadores de criação e destruição, e por meio das relações (2.62) sabemos que único valor que resta calcular é  $\alpha$ , definido em (2.83). Basta então especificarmos uma expressão para o campo oscilante, e assim a integral que define  $\alpha$  pode ser calculada.

Vamos supor que o campo oscilante é uniforme e monocromático, ou seja  $B_i(t) = B e^{-i\Omega_{\mathbf{r}t}$ . Tomando a transformada de Fourier discreta obtemos  $B_q(t) = B e^{-i\Omega_{\mathbf{r}t}t} \delta_{q,0}$ . Além disso, vamos supor que o campo oscilante é uma pequena perturbação de modo que podemos estender a integral ao passado distante, assim conectamos o estado do sistema antes do campo ser ligado

ao estado fundamental em  $t = 0$ , ou seja:

$$\alpha_q = \frac{ig\mu_B\sqrt{2S}}{2\hbar} \int_{-\infty}^t B e^{-i\Omega_{\text{rf}}t} \delta_{q,0} e^{i\omega_q t' - i\eta_0 t'} dt' = \frac{\sqrt{2S}g\mu_B B}{2\hbar} \frac{e^{i(\omega_q - \Omega_{\text{rf}})t}}{(\omega_q - \Omega_{\text{rf}} - i\eta_0)} \delta_{q,0}. \quad (2.87)$$

Sabemos por meio da relação de dispersão que  $\omega_0 = \frac{g\mu_B B^z}{\hbar}$ . Podemos perceber que sem a substituição  $\omega_q \rightarrow \omega_q - i\eta_0$ , a última integral diverge para valores  $\omega_q = \Omega_{\text{rf}}$ . Isso acontece pois o campo oscilante injeta constantemente energia no sistema e, sem uma fonte de dissipação, o sistema ganha energia indefinidamente. Obviamente essa situação não é real, e para contornar este problema, trabalhos anteriores [24] adicionaram um termo de convergência ao modelo,  $\eta_0$ . O termo  $\eta_0$  é retirado da exponencial no numerador para evitar divergências a medida que  $t$  se torna grande. A inserção deste termo garante a convergência das grandezas calculadas adiante. Podemos reescrever a equação (2.87) da seguinte forma:

$$\alpha_q = \sqrt{N_0} e^{i\varphi} e^{i(\omega_q - \Omega_{\text{rf}})t} \delta_{q,0}, \quad (2.88)$$

em que:

$$N_0 = |\alpha_0|^2 = \frac{g^2 \mu_B^2 S}{2\hbar^2 [(\omega_0 - \Omega_{\text{rf}})^2 + \eta_0^2]}, \quad (2.89)$$

$$\varphi = \arctan\left(\frac{\eta_0}{\omega_0 - \Omega_{\text{rf}}}\right). \quad (2.90)$$

### 2.6.2 Magnetização e suscetibilidade magnética no modelo

A magnetização é dada por:

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i \langle \vec{M}_i \rangle = \frac{g\mu_B}{Na^3} \sum_i \langle \vec{S}_i \rangle = \frac{g\mu_B}{Na^3} \sum_i (\langle S_i^x \rangle \hat{x} + \langle S_i^y \rangle \hat{y} + \langle S_i^z \rangle \hat{z}), \quad (2.91)$$

em que  $\gamma$  é o fator giromagnético. Os valores esperados das componentes de spin em cada sítio são calculadas utilizando as relações (2.38). Portanto:

$$\begin{aligned}
 M^x &= \frac{\gamma\hbar}{Na^3} \sum_i \langle S_i^x \rangle = \frac{\gamma\hbar\sqrt{2S}}{2a^3} \sum_i \langle a_i^\dagger(t) + a_i(t) \rangle = \\
 &= \frac{\gamma\hbar\sqrt{2S}}{2Na^3} \frac{1}{\sqrt{N}} \left[ \sum_{q,i} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \langle \alpha | a_q^\dagger e^{i\omega_q t} | \alpha \rangle + e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \langle \alpha | a_q e^{-i\omega_q t} | \alpha \rangle \right] = \\
 &= \frac{\gamma\hbar\sqrt{2S}}{2Na^3\sqrt{N}} \sum_i (\alpha_0^* e^{i\omega_0 t} + \alpha_0 e^{-i\omega_0 t}) = \frac{\gamma\hbar}{a^3} \sqrt{2Sn_0} \cos(\varphi - \Omega_{rf}t),
 \end{aligned} \tag{2.92}$$

onde  $n_0 = \frac{N_0}{N}$ . De forma similar:

$$M^y = \frac{\gamma\hbar}{a^3} \sqrt{2Sn_0} \text{sen}(\varphi - \Omega_{rf}t) \tag{2.93}$$

$$M^z = \frac{\gamma\hbar}{a^3} (S - n_0). \tag{2.94}$$

É possível notar que a característica do estado coerente é fazer com que a magnetização precesse em torno da direção do campo estático. Para realizarmos o cálculo da suscetibilidade magnética é necessário utilizarmos a teoria de resposta linear. A suscetibilidade magnética da magnetização em relação ao campo oscilante externo ( $\vec{H}$ ) em função do tempo ela é dada definida na equação (2.19). Assim:

$$\Delta\vec{M}_i(t) = \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{ij}(t-t') \vec{H}_j(t') dt'. \tag{2.95}$$

Estamos aqui interessados na resposta da magnetização ao campo oscilante, portanto, queremos as componentes perpendiculares à direção  $\hat{z}$ . Existe uma forma conveniente de expressar a magnetização para isso, tomando:

$$M_i^\perp = M_i^x + iM_i^y = \frac{\gamma\hbar}{a^3} \sqrt{2S} \langle a_i(t) \rangle, \Rightarrow \Delta M_i^\perp(t) = \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{ij}(t-t') H_j^\perp(t') dt'. \tag{2.96}$$

onde uma expressão semelhante foi usada para  $H_j^\perp$ . No espaço dos momentos e das frequências,

temos:

$$M_i^\perp(t) = \frac{1}{2\pi\sqrt{N}} \sum_q \int d\omega M_q^\perp(\omega) e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r}_i - \omega t)}, \quad (2.97)$$

em que o mesmo é feito para  $H_j^\perp$ . Assim, substituindo as transformações em (2.96) e tomando  $\chi_q(\omega) = \sum_j \int dt' \chi_{ij}(t-t') e^{i[(\vec{q}\cdot(\vec{r}_j - \vec{r}_i) - \omega(t'-t))]$ , somos levados diretamente à:

$$M_q^\perp(\omega) = \chi_q(\omega) H_q^\perp(\omega). \quad (2.98)$$

Através da equação (2.96) é possível calcular  $M_q^\perp(t)$ :

$$M_q^\perp(t) = \frac{\gamma\hbar}{a^3} \sqrt{2S} \langle a_q(t) \rangle = \frac{\gamma\hbar}{a^3} \sqrt{2S} \alpha_q(t) e^{-i\omega_q t} = \frac{\gamma M_S B_q(t)}{\omega_0 - \Omega_{rf} - i\eta_0}, \quad (2.99)$$

em que  $M_S = \frac{\gamma\hbar S}{a^3}$  e  $B_q(t) = B e^{-i\Omega_{rf} t} \delta_{q,0}$ . Transformando o último resultado para o espaço das frequências obtemos  $M_q^\perp(\omega) = \gamma M_S B_q(\omega) (\omega_0 - \Omega_{rf} - i\eta_0)^{-1}$ . Sabemos do eletromagnetismo que:

$$B_q(\omega) = \mu_0 (H_q(\omega) + M_q(\omega)), \quad (2.100)$$

em que  $\mu_0$  é a permeabilidade magnética no vácuo. Substituindo (2.99) na última equação e isolando  $M_q(\omega)$ :

$$M_q^\perp(\omega) = \frac{\omega_M (\omega_0 - \omega_M - \Omega_{rf} - i\eta_0)}{(\omega_0 - \omega_M - \Omega_{rf})^2 + \eta_0^2} H_q^\perp(\omega), \quad (2.101)$$

com  $\omega_M = \gamma M_S \mu_0$ . Observando a equação (2.98) juntamente com a equação acima podemos notar o valor da suscetibilidade complexa  $\chi_q(\omega) = (\chi' + i\chi'') \delta_{q,0}$  com suas componentes real e imaginária dadas por:

$$\chi' = \frac{\omega_M (\omega_0 - \omega_M - \Omega_{rf})}{(\omega_0 - \omega_M - \Omega_{rf})^2 + \eta_0^2}, \quad \chi'' = \frac{\omega_M \eta_0}{(\omega_0 - \omega_M - \Omega_{rf})^2 + \eta_0^2}. \quad (2.102)$$

Como a dependência na frequência e no momento é restrita a apenas um valor, temos:

$$\chi_{ij}(t-t') = (\chi' + i\chi'') \delta_{i,j} \delta(t'-t). \quad (2.103)$$

Assim, baseado nas definições de  $M_i^\perp$  e  $H_i^\perp$ , finalmente podemos escrever:

$$\begin{pmatrix} M_i^x \\ M_i^y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi' & -\chi'' \\ \chi'' & \chi' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_i^x \\ H_i^y \end{pmatrix}$$

Este cálculo servirá como comparação quando calcularmos as mesmas quantidades no modelo de Hamiltonianas não-Hermitianas discutido nos capítulos III e IV.

## 2.7 Termodinâmica de estados coerentes de mágnons

Para discutirmos a termodinâmica do sistema da seção anterior basta tomarmos as médias sem considerar o sistema em seu estado fundamental, mas sim em temperatura finita. Assim, a média envolve os estados excitados com o peso de Boltzmann. Apesar da Hamiltoniana depender do tempo, não consideraremos aqui soluções de quasi-equilíbrio. Portanto, o que devemos calcular neste caso que se diferencia do caso anterior é:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(\rho A) = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta H_0} S^\dagger(t) A(t) S(t) | n \rangle, \quad (2.104)$$

em que  $|n\rangle$  representa o espaço de Fock do sistema,  $Z$  a função de partição e  $\beta = \frac{1}{kT}$ . Assim como anteriormente,  $S(t)$  dá origem ao operador deslocamento e a atuação de  $e^{-\beta H_0}$  é trivial em seus autoestados  $|n\rangle$ . Portanto, a média termodinâmica torna-se:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n_{q_1}, \dots} e^{-\beta(E_0 + \sum_k \hbar \omega_k n_k)} \langle \dots | \langle n_{q_1} | D^\dagger(\alpha) A(t) D(\alpha) | n_{q_1} \rangle | \dots \rangle. \quad (2.105)$$

Este caso é adequado para utilizarmos os estados coerentes térmicos discutidos na subseção (2.5.1). Seguindo a equação (2.68) temos  $D(\alpha)|n\rangle = |n, \alpha\rangle$ . Como estamos interessados na magnetização, basta calcularmos os valores esperados dos operadores de criação, destruição e número. Começando pelo valor esperado do operador número para um q-ésimo comprimento

de onda ( $n_q$ ):

$$\begin{aligned}
 \langle n_q \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{n_{q_1}, \dots} e^{-\beta \sum_k \hbar \omega_k n_k} \langle \dots | \langle n_{q_1}, \alpha_{q_1} | n_q(t) | n_{q_1}, \alpha_{q_1} \rangle | \dots \rangle \\
 &= \frac{1}{\sum_q e^{-\beta \sum_k \hbar \omega_k n_k}} \sum_{n_{q_1}, \dots} e^{-\beta \sum_k \hbar \omega_k n_k} (n_q + |\alpha_q|^2) \\
 &= \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_q} - 1} + |\alpha_q|^2 = n_B(\hbar \omega_q) + |\alpha_q|^2,
 \end{aligned} \tag{2.106}$$

em que  $n_B$  é a distribuição de Bose-Einstein. Para demonstrar as últimas relações, utilizamos a equação (2.83) para obter a dependência temporal do operador número. A atuação do operador número nos estados coerentes térmicos é dada pela equação (2.71). De forma similar:

$$\langle a_q(t) \rangle = \alpha_q e^{-i\omega_q t}, \tag{2.107}$$

$$\langle a_q^\dagger(t) \rangle = \alpha_q^* e^{i\omega_q t}. \tag{2.108}$$

Dessa forma todas as peculiaridades do caso térmico foram resolvidas, restando calcular a magnetização. Pelos valores calculados nas equações anteriores apenas a componente  $z$  se modifica, assim:

$$M^x = \frac{\gamma \hbar}{a^3} \sqrt{2S n_0} \cos(\varphi - \Omega_{\text{rf}} t), \tag{2.109}$$

$$M^y = \frac{\gamma \hbar}{a^3} \sqrt{2S n_0} \text{sen}(\varphi - \Omega_{\text{rf}} t), \tag{2.110}$$

$$M^z = \frac{\gamma \hbar}{a^3} (S - n_0 - n_B(\hbar \omega_0)). \tag{2.111}$$

Esses valores servirão de comparação com a termodinâmica dos estados coerentes de mágnons dissipativos.

## 2.8 Mecânica quântica não-Hermitiana

A introdução de termos não-Hermitianos na Hamiltoniana é um dos passos para a generalização da mecânica quântica denominada mecânica quântica não-Hermitiana (MQNH). A impossibilidade de garantir autovalores reais para Hamiltonianas não-Hermitianas é bem conhe-

cida desde cursos básicos de mecânica quântica. Porém como já mostrado em [29], sob certas condições (quando o operador Hamiltoniano possui simetria de paridade temporal) é possível verificar fortes evidências que os autovalores da Hamiltoniana não-Hermitiana (HNH) ainda assim são reais. Além disso, em certos sistemas específicos descritos por HNHs, autovalores complexos são os elementos chave para o surgimento da dissipação nestes sistemas.

Como exemplo de sistemas nos quais HNH dão origem a dissipação, temos o oscilador harmônico quântico amortecido. Com a adição de um termo quadrático não-Hermitiano na Hamiltoniana do oscilador harmônico quântico, é possível obter o análogo quântico do oscilador harmônico amortecido clássico [30]. Por essa razão, foi percebido que HNHs podem ser uma forma simples para se descrever sistemas dissipativos em mecânica quântica, uma tarefa nada trivial dado que todas as forças no nível quântico são conservativas. A adição do termo não-Hermitiano é de alguma forma capaz de capturar o comportamento efetivo de sistemas com dissipação de energia.

A MQNH tem certas particularidades, como norma não unitária e equações de dinâmica modificadas. Para abordarmos alguns destes pontos específicos vamos partir de uma HNH para um sistema dissipativo geral da seguinte forma:

$$H_D = H - i\Gamma, \quad (2.112)$$

em que  $H$  é o termo do sistema sem dissipação,  $i\Gamma$  o termo de dissipação. A não-hermiticidade da Hamiltoniana é devido ao fator imaginário que acompanha  $\Gamma$ . Assumiremos que para um sistema com HNH a dinâmica dos estados ainda é dada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H_D |\psi(t)\rangle. \quad (2.113)$$

Como de costume, a evolução temporal de um estado inicial  $|\psi(0)\rangle$  é governada pelo operador evolução:

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle; \quad U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_D t}. \quad (2.114)$$

O estado  $|\psi(t)\rangle$  pode ser expandido em termos dos autoestados do sistema sem dissipação já que os autoestados do sistema sem dissipação podem abranger todo espaço de Hilbert de

interesse:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle; \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1. \quad (2.115)$$

Portanto, utilizando a equação (2.114) podemos escrever  $|\psi(t)\rangle$  como:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma_n t} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}, \quad (2.116)$$

em que  $\Gamma_n$  e  $E_n$  são os autovalores de  $\Gamma$  e  $H$ , respectivamente (assumindo  $[H, \Gamma] = 0$ ). Caso tentemos normalizar os estados:

$$N(t) = \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 e^{-\frac{2}{\hbar}\Gamma_n t}, \quad (2.117)$$

concluiremos que a norma  $N(t)$  é em geral não-unitária e também dependente do tempo. A derivada temporal da norma é:

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} N(t) = -2 \langle\psi(t)|\Gamma|\psi(t)\rangle. \quad (2.118)$$

Sendo assim, temos que redefinir o valor esperado de um observável  $A$  em um tempo  $t$  como:

$$\langle A \rangle_t = \frac{\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle}{N(t)} = \langle\phi(t)|A|\phi(t)\rangle, \quad (2.119)$$

onde definimos o estado  $|\phi(t)\rangle$  normalizado:

$$|\phi(t)\rangle = \frac{|\psi(t)\rangle}{\sqrt{N(t)}}. \quad (2.120)$$

Podemos derivar o valor esperado usual de um operador  $A$  para obter:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|[A, H]|\psi(t)\rangle - i \langle\psi(t)|\{A, \Gamma\}|\psi(t)\rangle, \quad (2.121)$$

onde a equação de Schrödinger foi utilizada para se calcular a derivada dos estados, e  $[ , ]$  e  $\{ , \}$  representam as relações de comutação e anticomutação, respectivamente. Utilizando a

equação (2.119) podemos derivar a equação (2.121) em relação ao tempo e obter:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \phi(t) | A | \phi(t) \rangle = \langle \phi(t) | [A, H] | \phi(t) \rangle - 2i\Delta_{A\Gamma}^2, \quad (2.122)$$

em que  $\Delta_{A\Gamma}^2 = \langle \phi(t) | \frac{1}{2} \{A, \Gamma\} | \phi(t) \rangle - \langle \phi(t) | A | \phi(t) \rangle \langle \phi(t) | \Gamma | \phi(t) \rangle$ . Por fim, é possível notar que caso derivemos no tempo o estado normalizado em todos os tempos obtemos uma modificação da equação de Schrödinger devido à adição de um termo não linear:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle = \left( H - i[\Gamma, |\phi(t)\rangle \langle \phi(t)|] \right) |\phi(t)\rangle. \quad (2.123)$$

Concluimos essa rápida introdução à MQNH dizendo que, como era de se esperar, todos os resultados aqui obtidos retornam para mecânica quântica usual quando  $\Gamma = 0$ .

# Capítulo III

## Estados coerentes de mágnons dissipativos

Nos capítulos anteriores fizemos uma revisão de temas relevantes para o trabalho. Daqui em diante, o apresentaremos nossos resultados recentemente publicados [9]. Mais especificamente, aqui será abordado o modelo quântico para a dissipação de ondas de spin utilizando HNH. Discutiremos as peculiaridades relacionadas à inserção de um termo não-Hermitiano na Hamiltoniana do sistema discutido na seção (2.6) bem como o cálculo de quantidades de interesse que demonstram a validade do modelo. Os cálculos neste capítulo serão em temperatura nula, a termodinâmica do modelo será tratada no próximo capítulo.

### 3.1 Dissipação no formalismo de interação

Apresentaremos aqui uma forma conveniente de se trabalhar com Hamiltonianas como na equação (2.112), onde no problema original (sem dissipação) o formalismo de interação era adequado. Para isso, vamos definir:

$$H(t) = H_0 - i\Gamma + V(t), \quad (3.1)$$

em que  $[H_0, \Gamma] = 0$ . De forma análoga ao que foi feito anteriormente, desejamos calcular o valor esperado  $\langle A \rangle$  e, desse modo, inserimos a seguinte identidade na equação (2.8) (assumindo

$t_0 = 0$  para simplificar a notação):

$$\mathbb{I} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t} e^{\frac{1}{\hbar}\Gamma t} e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}, \quad (3.2)$$

na equação (2.6). Após a inserção da identidade, definimos:

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} A e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}, \quad (3.3)$$

$$S(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(H_0 - i\Gamma)t} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H t' dt'}. \quad (3.4)$$

Essas definições apresentam duas características importantes. Primeiro, ela possibilita a determinação da evolução temporal dos operadores, semelhante ao caso sem dissipação. Segundo, para o operador  $S(t)$  definido na equação (3.4) é fácil demonstrar a existência dos estados coerentes. Caso não inseríssemos o termo  $e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t} e^{\frac{1}{\hbar}\Gamma t}$  na identidade (3.2), não seria possível obter o operador deslocamento a partir do operador  $S(t)$ . Dessa forma, uma estratégia diferente da escolhida neste trabalho sacrificaria uma ou ambas das características mencionadas anteriormente, características necessárias para que a descrição aqui feita seja bem similar à descrição original sem dissipação.

De forma idêntica à seção (2.1), obtemos:

$$\frac{dS(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} e^{\frac{\Gamma t}{\hbar}} e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} (H_0 - i\Gamma - H) \mathbb{I} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H t' dt'} = -\frac{i}{\hbar} e^{\frac{\Gamma t}{\hbar}} \hat{V}(t) e^{-\frac{\Gamma t}{\hbar}} S(t), \quad (3.5)$$

em que a identidade inserida na última equação foi substituída pela equação (3.2). Integrando essa equação no tempo obtemos a seguinte equação autoconsistente:

$$S(t) = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{\frac{\Gamma t}{\hbar}} \hat{V}(t') e^{-\frac{\Gamma t}{\hbar}} S(t') dt'. \quad (3.6)$$

Como trata-se de uma equação autoconsistente, podemos substituir o operador  $S(t)$  no lado direito da equação pela própria equação (3.6). Iterando este processo repetidas vezes obtemos:

$$S(t) = T \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{\frac{1}{\hbar}\Gamma t'} \hat{V}(t') e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t'} dt' \right]. \quad (3.7)$$

Dessa forma, o valor esperado de um operador  $A$  é definido da seguinte maneira:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi(0) | S^\dagger(t) e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t} \hat{A}(t) e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t} S(t) | \Psi(0) \rangle. \quad (3.8)$$

Observe que  $\hat{A}(t)$  é calculado através da equação de Heisenberg da mesma forma que no formalismo de interação usual. Isto é importante pois, como mencionado anteriormente, caso o termo de dissipação estivesse acoplado à  $H_0$ ,  $\hat{A}(t)$  dependeria de  $\Gamma$  e a equação de Heisenberg não poderia mais ser utilizada para encontrar a evolução temporal de  $\hat{A}(t)$ . Futuras simplificações só podem ser feitas caso os termos da Hamiltoniana sejam explicitados.

## 3.2 Inserção do termo não-hermitiano

Como dito anteriormente trabalharemos com a Hamiltoniana de um ferromagneto imerso em um campo magnético estático e dinâmico. Seguindo os passos de Graefe *et al.* [30], definiremos o termo de dissipação da seguinte forma:

$$\Gamma = \sum_q \hbar \eta_q a_q^\dagger a_q, \quad (3.9)$$

onde  $\eta_q$  é uma quantidade proporcional ao inverso do tempo de meia-vida dos mágnons. Além disso, com exceção das definições da seção anterior, estamos utilizando a mesma notação da seção (2.6). Podemos utilizar o fato que o termo  $H_0$  e  $V(t)$  são dados pela equação (2.79) e obter uma expressão para equação (3.7) neste caso. Primeiramente, devemos eliminar a atuação dos operadores  $e^{\pm \frac{\Gamma t}{\hbar}}$  nos operadores de criação e aniquilação. A equação (3.7) pode ser reescrita de uma forma mais adequada através da utilização da fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff que dá origem a seguinte propriedade:

$$e^{\frac{\Gamma t}{\hbar}} a^\dagger e^{-\frac{\Gamma t}{\hbar}} = e^{\eta t} a^\dagger, \quad (3.10)$$

e da mesma forma:

$$e^{\frac{\Gamma t}{\hbar}} a e^{-\frac{\Gamma t}{\hbar}} = e^{-\eta t} a. \quad (3.11)$$

Portanto, obtemos a seguinte expressão análoga para a equação (3.7):

$$S(t) = T \exp \left\{ \sum_q [\alpha_{1q}(t) a_q^\dagger - \alpha_{2q}^*(t) a_q] \right\}, \quad (3.12)$$

sendo:

$$\alpha_{1q}(t) = \frac{ig\mu_B\sqrt{2S}}{2\hbar} \int_{-\infty}^t B_q(t') e^{i\omega_q t'} e^{\eta_q t'} dt', \quad (3.13)$$

$$\alpha_{2q}^*(t) = -\frac{ig\mu_B\sqrt{2S}}{2\hbar} \int_{-\infty}^t B_q(t') e^{-i\omega_q t'} e^{-\eta_q t'} dt', \quad (3.14)$$

onde novamente realizamos a conexão do estado em  $t = 0$  com o passado distante. Fazendo desta forma, estamos interessados apenas no estado final do sistema. Caso o cálculo fosse de 0 a  $t$ , obteríamos valores esperados das quantidades relaxando enquanto recebem energia do campo oscilante e perdem a mesma por meio de dissipação. Porém o tempo característico dessa transição, no qual o campo oscilante é ligado e o sistema relaxa até o estado final, é muito curto, pois em geral este tempo característico é da ordem de  $\frac{1}{\eta_0} = 10^{-10}$ s [31]. Portanto, o cálculo de grandezas durante este tempo intermediário tem pouca relevância e não será feito aqui.

Observe nas equações (3.13) e (3.14) que  $\alpha_{1q}^* \neq \alpha_{2q}$ , diferente do que ocorre no caso sem dissipação. Porém podemos notar que a equação (3.12) torna-se a equação (2.82) quando  $\eta_q = 0$ , como esperado. Caso consideremos  $|\Psi(0)\rangle = |0\rangle$  (uma aproximação para um sistema com  $T \approx 0$ ), em que  $|0\rangle$  trata-se do estado de vácuo de Fock, é possível mostrar, após algum algebrismo, que a atuação do operador  $S(t)$  é dada por:

$$S(t)|0\rangle = \exp \left( \sum_q \frac{\alpha_{1q} (\alpha_{1q}^* - \alpha_{2q}^*)}{2} \right) D(\alpha_1)|0\rangle, \quad (3.15)$$

em que  $D(\alpha_1)$  é definido pela equação (2.59) e a atuação do operador de ordenamento temporal pode ser calculada através da propriedade (2.61d). Sendo assim, podemos escrever:

$$S(t)|0\rangle = \exp \left( \sum_q \frac{\alpha_{1q} (\alpha_{1q}^* - \alpha_{2q}^*)}{2} \right) |\alpha_1\rangle, \quad (3.16)$$

onde  $|\alpha_1\rangle$  é um estado coerente. A atuação do operador de ordenamento temporal dá origem a

termos constantes que também surgem no denominador do cálculo do valor esperado, portanto, ele será ignorado. Daqui em diante, para não carregar a notação, trabalharemos apenas com a atuação dos operadores no  $q$ -ésimo estado quântico, o estado total é dado por um produtório dos termos aqui calculados.

Considerando agora a atuação do operador  $e^{-\frac{\Gamma t}{\hbar}}$  nos estados coerentes, que aparecem na equação (3.8), podemos fazer novas simplificações. É fácil verificar que:

$$e^{-\eta_q a_q^\dagger a_q t} S_q(t) |0\rangle = e^{i\Phi} \exp\left(\frac{-\alpha_{1q} \alpha_{2q}^*}{2}\right) \exp\left(\frac{|\alpha_{1q}|^2 e^{-2\eta_q t}}{2}\right) |\alpha_{1q} e^{-\eta_q t}\rangle. \quad (3.17)$$

O novo estado coerente trata-se de um estado coerente usual em que o autovalor, que especifica o estado, decai exponencialmente com o tempo. Dado que isso trata-se apenas de um novo número complexo, é possível mostrar que o operador deslocamento que dá origem a este novo estado obedece todas as propriedades usuais do operador deslocamento, inclusive a unitariedade. Apesar de ser um estado coerente usual, o decaimento exponencial abre espaço para uma explicação física do fenômeno de dissipação que será abordada mais adiante.

Novamente, o fator normal  $N(t)$  não é constante no tempo e para os estados coerentes definidos acima, obtemos:

$$N_q(t) = \langle \Psi_q(t) | \Psi_q(t) \rangle = \exp(|\alpha_{1q}|^2 e^{-2\eta_q t}) \exp\left(-\frac{(\alpha_{1q} \alpha_{2q}^* + \alpha_{1q}^* \alpha_{2q})}{2}\right). \quad (3.18)$$

Sempre que calcularmos o valor esperado de um operador  $A$  qualquer, devemos dividir pela sua normalização. Ao fazermos isso na equação (3.8) e utilizarmos a nova definição apresentada na equação (3.17). Obtemos uma forma equivalente de se calcular o valor esperado, dada por:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle 0 | S^\dagger(t) e^{-\eta_q a_q^\dagger a_q t} \hat{A}(t) e^{-\eta_q a_q^\dagger a_q t} S(t) | 0 \rangle}{N(t)} = \langle \alpha_{1q} e^{-\eta_q t} | \hat{A}(t) | \alpha_{1q} e^{-\eta_q t} \rangle. \quad (3.19)$$

Temos assim que o valor esperador  $\langle A \rangle$  para um estado coerente dissipativo é facilmente calculado considerando um estado coerente com autovalor  $\alpha_{1q} e^{-\eta_q t}$ . Por fim, para calcularmos o valor de  $\alpha_{1q}$  através da equação (3.13) basta especificar  $B_i(t)$ . Tomando  $B_i(t)$  como sendo

um campo monocromático e uniforme de frequência  $\Omega_{rf}$  com uma amplitude  $B$ , temos:

$$B_i(t) = B e^{-i\Omega_{rf}t}, \quad (3.20)$$

e dessa forma a equação (3.13) fornece:

$$\alpha_{1q}(t) = \sqrt{N_0} e^{i\varphi} e^{i(\omega_q - \Omega_{rf} - i\eta_q)t} \delta_{q,0}, \quad (3.21)$$

em que os termos  $N_0$  e  $\varphi$  são definidos nas equações (2.89) e (2.90), respectivamente. Definiremos  $\alpha_q(t) = \alpha_{1q}(t) e^{-\eta_q t}$ , assim, a equação (3.19) se torna:

$$\langle A \rangle = \langle \alpha_q(t) | \hat{A}(t) | \alpha_q(t) \rangle. \quad (3.22)$$

Como a receita para o cálculo de valores esperados se tornou exatamente a mesma de um sistema sem termo não-Hermitiano, é esperado que os cálculos de grandezas neste modelo retornem os mesmos valores quando comparados aos modelos em que o termo de dissipação é inserido de forma fenomenológica, como feito na seção (2.6).

### 3.3 Dinâmica do campo de spin

Nesta seção faremos o cálculo de algumas quantidades de interesse, para isso basta calcular:

$$\langle A_q \rangle = \langle \alpha_q(t) | \hat{A}_q(t) | \alpha_q(t) \rangle. \quad (3.23)$$

Começaremos pelos valores esperados dos operadores criação, aniquilação e número. Para isso utilizaremos as propriedades descritas pelas equações (2.62):

$$\langle a_q(t) \rangle = \sqrt{N_0} e^{i\varphi} e^{-i\Omega_{rf}t} \delta_{q,0}, \quad (3.24)$$

$$\langle a_q^\dagger(t) \rangle = \sqrt{N_0} e^{-i\varphi} e^{i\Omega_{rf}t} \delta_{q,0}, \quad (3.25)$$

$$\langle a_q^\dagger(t) a_q(t) \rangle = N_0 \delta_{q,0}. \quad (3.26)$$

Podemos notar claramente que  $N_0$  trata-se do número de mágnons com momento  $q = 0$ .

Seguindo o mesmo procedimento realizado na subsecção (2.6.2), obtemos:

$$M^x = \frac{\gamma \hbar}{a^3} \sqrt{2Sn_0} \cos(\varphi - \Omega_{rf}t), \quad (3.27)$$

$$M^y = \frac{\gamma \hbar}{a^3} \sqrt{2Sn_0} \text{sen}(\varphi - \Omega_{rf}t), \quad (3.28)$$

$$M^z = \frac{\gamma \hbar}{a^3} (S - n_0), \quad (3.29)$$

exatamente como esperado, na presença de dissipação e do campo de microondas o sistema deve evoluir para um estado estacionário no qual a potência fornecida pelo campo é igual a potência dissipada. Obviamente se os valores de magnetização são os mesmos da seção (2.6), obteremos os mesmos valores para suscetibilidade magnética já calculados. Podemos analisar como a amplitude de magnetização varia com a intensidade da dissipação, como mostrado na figura (3.1). Este resultado é previsível, dado que quando o campo externo oscila na frequência natural do sistema, a taxa de transmissão de energia do campo ao sistema é maximizada, assim como em um oscilador clássico amortecido e forçado. Já o valor de  $N_0$

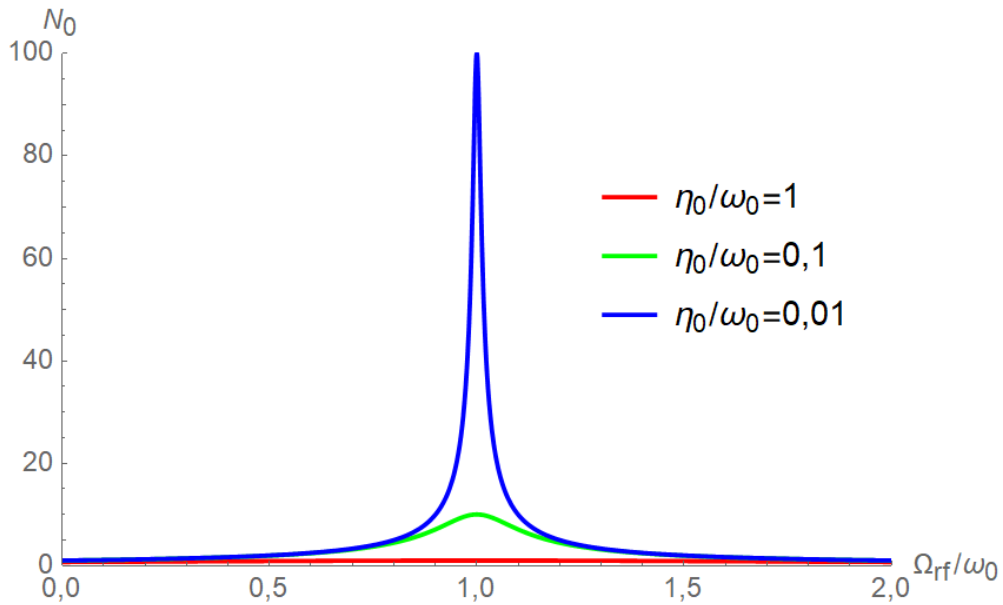


Figura 3.1: O gráfico mostra o valor de  $N_0$  para diferentes valores da razão  $\Omega_{rf}/\omega_0$ , cada curva corresponde a diferentes intensidades da dissipação dada pela razão  $\eta_0/\omega_0$ . Nota-se que o valor de  $N_0$  é máximo sobre na frequência de ressonância,  $\Omega_{rf}/\omega_0 = 1$ .

na frequência de ressonância decai rapidamente a medida que a dissipação aumenta, como pode ser visto na figura (3.2). O que também é esperado, afinal, quanto mais intensa é a dissipação, menos pronunciada será a resposta do sistema.

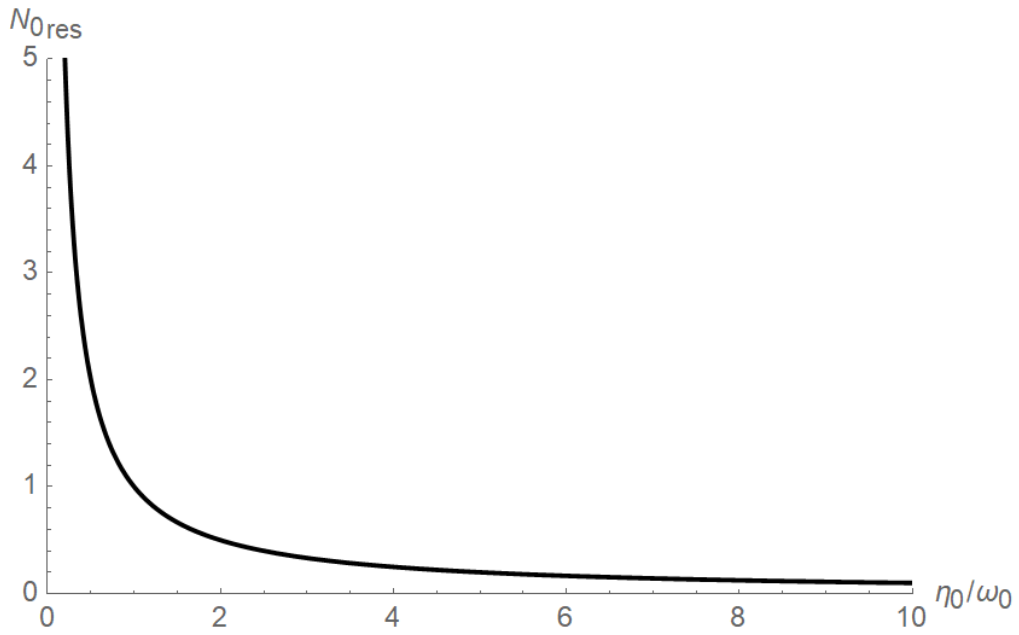


Figura 3.2: O valor  $N_0$  na região de ressonância (quando o campo oscilante tem frequência igual a frequência característica do sistema,  $\Omega_{\text{rf}}/\omega_0 = 1$ ) em função da razão  $\eta_0/\omega_0$ .

Buscando averiguar se o sistema de fato se encontra em um estado coerente, faremos o cálculo da *ODLRO*, sendo assim analisaremos o grau de coerência dos pares de operadores de spin de diferentes sítios, como os operadores em diferentes sítios comutam o cálculo é simples:

$$\langle S_i^x S_j^x \rangle = 2Sn_0 \cos^2(\varphi - \Omega_{\text{rf}}t) + \int f_x(q) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} d^3q, \quad (3.30a)$$

$$\langle S_i^y S_j^y \rangle = -2Sn_0 \sin^2(\varphi - \Omega_{\text{rf}}t) + \int f_y(q) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} d^3q, \quad (3.30b)$$

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = (S - n_0)^2 + \int f_z(q) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} d^3q, \quad (3.30c)$$

onde as funções  $f_i$  são funções que dependem de flutuações do campo  $B_i(t)$  (caso as levemos em consideração) que o tornam não uniforme. As integrais das funções de  $f_i$  são conhecidas como integrais de Ornstein-Zernick [32]. Estas integrais podem ser calculadas na primeira zona de Brillouin e tendem a 0 quando  $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \rightarrow \infty$ . Como a superposição de estados fisicamente distantes na rede é finita, independentemente da distância, podemos concluir que o sistema possui de fato *ODLRO*, portanto, encontra-se em um estado coerente.

### 3.4 Regime não-forçado

Quando o campo oscilante é desligado esperamos que a dissipação domine as trocas energéticas do sistema. Como vimos na seção (3.2), os estados coerentes tendem à um estado terminal. Iremos adotar os efeitos da dissipação caso o sistema, já neste estado terminal, evoluísse sem o campo oscilante.

Suponha que o campo oscilante é desligado no instante  $t = 0$ . Nesta situação temos que o operador  $S(t)$  será unitário pois  $\hat{V}$  será nulo. O estado inicial do sistema após o campo oscilante ser desligado será  $|\alpha_q(0)\rangle$  em que:

$$\alpha_q(t) = \sqrt{N_0} e^{i\varphi} \delta_{q,0} \quad (3.31)$$

Sendo assim, a equação (3.8) torna-se:

$$\langle A \rangle = \langle \alpha_q(t) | e^{-\eta_q a_q^\dagger a_q} \hat{A}(t) e^{-\eta_q a_q^\dagger a_q} | \alpha_q(t) \rangle. \quad (3.32)$$

De maneira similar à seção (3.2), podemos normalizar os estados, de modo que:

$$e^{-\eta_q a_q^\dagger a_q} | \alpha_q(t) \rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha_q(t)|^2}{2}\right) \exp\left(\frac{|\alpha_q(t)|^2 e^{-2\eta_q t}}{2}\right) | \alpha_q(t) e^{-\eta_q t} \rangle. \quad (3.33)$$

O surgimento desse estado já indica que sem o campo oscilante os estados coerentes desaparecem para tempos muito longos. Isso é de fato o esperado, afinal, como há dissipação, sem a injeção de energia pelo campo oscilante, toda energia será dissipada e o sistema retornará ao estado fundamental (dado que estamos trabalhando na aproximação de temperatura nula).

Assim como anteriormente, a norma é dada por:

$$N(t) = \langle \alpha_q(t) | e^{-\eta_q a_q^\dagger a_q} e^{-\eta_q a_q^\dagger a_q} | \alpha_q(t) \rangle = \exp(-|\alpha_q(t)|^2) \exp(|\alpha_q(t)|^2 e^{-2\eta_q t}), \quad (3.34)$$

e portanto, o valor esperado de um operador  $A$  pode ser calculado como:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \alpha_q(t) | e^{-\eta_q a_q^\dagger a_q} \hat{A}(t) e^{-\eta_q a_q^\dagger a_q} | \alpha_q(t) \rangle}{N(t)} = \langle \alpha_q(t) e^{-\eta_q t} | \hat{A}(t) | \alpha_q(t) e^{-\eta_q t} \rangle. \quad (3.35)$$

Começando novamente pelos valores esperados dos operadores aniquilação, criação e

número, começando:

$$\langle a_q(t) \rangle = \sqrt{N_0} e^{i\varphi} e^{-i\omega_q t} e^{-\eta_q t} \delta_{q,0}, \quad (3.36)$$

$$\langle a_q^\dagger(t) \rangle = \sqrt{N_0} e^{-i\varphi} e^{i\omega_q t} e^{-\eta_q t} \delta_{q,0}, \quad (3.37)$$

$$\langle a_q^\dagger(t) a_q(t) \rangle = N_0 e^{-2\eta_q t} \delta_{q,0}. \quad (3.38)$$

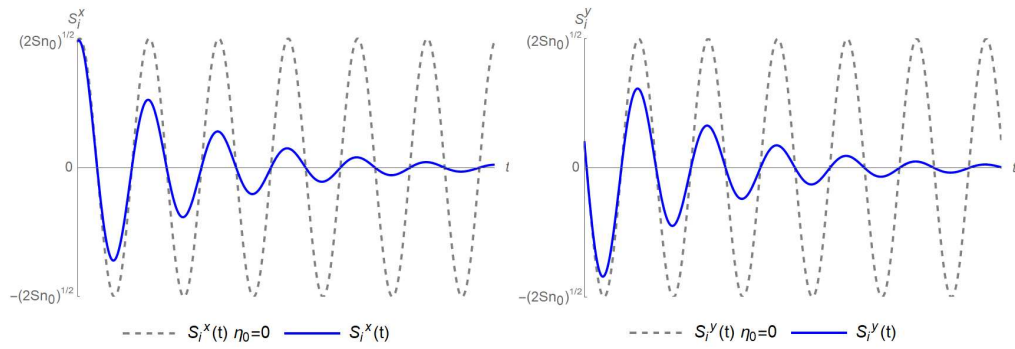


Figura 3.3: O valor esperado da componente  $x$  (a esquerda) e  $y$  (a direita) do vetor de spin para o caso  $\eta_0 = 0$  e  $\eta_0 \neq 0$ .

As componentes da magnetização são então determinadas e dadas por:

$$M^x = \frac{\gamma \hbar}{a^3} \sqrt{2S n_0} \cos(\varphi + \omega_q t) e^{-\eta_0 t}, \quad (3.39a)$$

$$M^y = \frac{\gamma \hbar}{a^3} \sqrt{2S n_0} \sin(\varphi + \omega_q t) e^{-\eta_0 t}, \quad (3.39b)$$

$$M^z = \frac{\gamma \hbar}{a^3} (S - n_0 e^{-2\eta_0 t}), \quad (3.39c)$$

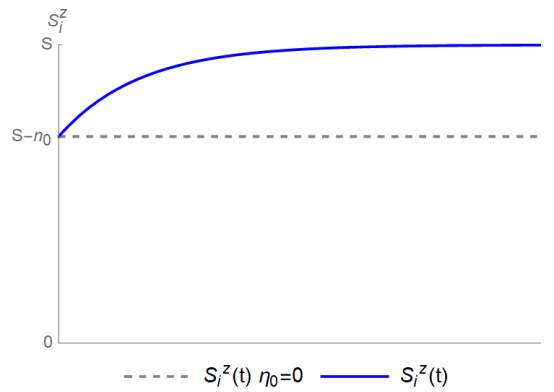


Figura 3.4: O valor esperado da componente  $z$  do vetor de spin para o caso  $\eta_0 = 0$  e  $\eta_0 \neq 0$ .

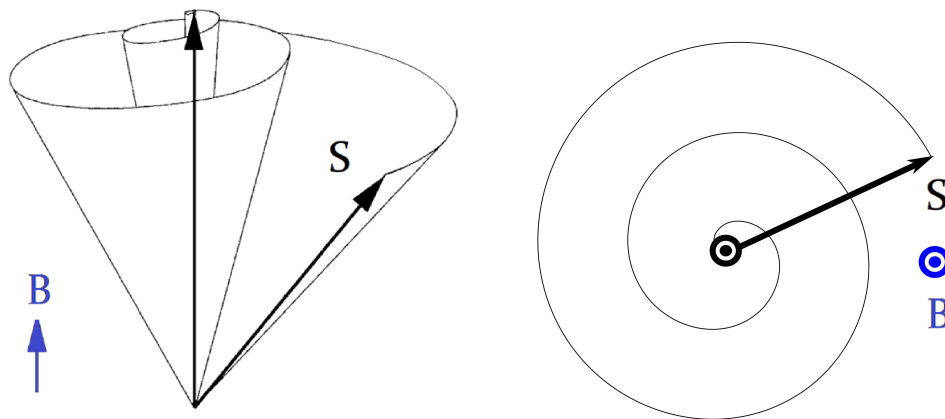


Figura 3.5: À esquerda: ilustração do valor esperado do vetor de spin se alinhando com o campo estático a medida que o tempo passa; À direita: vista de cima da ilustração apresentada à direita.

Assim como se esperava, ao olharmos para as figuras (3.3) e (3.4) o valor esperado de  $S^z$  tende ao valor máximo  $S$ , enquanto que as outras componentes se anulam. Ou seja, o spin de todos os sítios se alinham com o campo estático. A figura (3.5) mostra uma ilustração da situação. Esse comportamento já foi descrito pela equação semi-clássica Landau-Lifshitz-Gilbert, desta vez, apresentamos um modelo quântico para o mesmo fenômeno.

# Capítulo IV

## Termodinâmica de estados coerentes de mágnons dissipativos

Neste capítulo analisaremos o mesmo modelo discutido no capítulo anterior, porém faremos o cálculo em temperaturas finitas. Os resultados aqui apresentados são inéditos e ainda não foram publicados. Discutiremos aqui as peculiaridades da inserção de um termo não-Hermitiano na Hamiltoniana de um sistema discutido na seção (2.6). Calcularemos aqui quantidades de interesse para o modelo assim como no capítulo anterior.

### 4.1 Médias termodinâmicas

Durante o capítulo anterior calculamos o resultados supondo que o sistema se encontrava no estado fundamental. Como estamos interessados na termodinâmica do sistema, devemos repetir os cálculos realizando médias termodinâmicas. Isso significa que, semelhante à equação (2.104), o valor esperado de um operador  $A$  é dado por:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(\rho A) = \frac{1}{Z} \sum_{n_{q_1}, \dots} \langle n_{q_1}, \dots | e^{-\beta H_0} S^\dagger(t) e^{-\frac{1}{\hbar} \Gamma t} A(t) e^{-\frac{1}{\hbar} \Gamma t} S(t) | n_{q_1}, \dots \rangle, \quad (4.1)$$

porém como estamos no caso dissipativo, no qual o termo não-Hermitiano foi inserido, o operador evolução temporal no formalismo de interação  $S(t)$  possui o termo de dissipação como na equação (3.7), que no caso de nosso sistema é dado pela equação (3.12). Lembramos que no capítulo anterior foi necessário certo algebrismo para que pudéssemos atuar o operador

$S(t)$  no estado fundamental. Agora que o operador  $S(t)$  atua em estados excitados do espaço de Fock, a situação se complica consideravelmente.

Antes de começarmos o cálculo, notemos que assim como anteriormente, estamos analisando um campo oscilante monocromático uniforme, portanto, a equação (3.21) continua válida e assim evitamos os somatórios em  $q$ . Apenas mágnons com momento  $q = 0$  são excitados e daqui em diante então assumiremos a notação:

$$\alpha_{1q}(t) \rightarrow \alpha_1(t) = \sqrt{N_0} e^{i\varphi} e^{i(\omega_0 - \Omega_H - i\eta_0)t}, \quad (4.2a)$$

$$\alpha_{2q}(t) \rightarrow \alpha_2(t) = \sqrt{N_0} e^{i\varphi} e^{i(\omega_0 - \Omega_H + i\eta_0)t}, \quad (4.2b)$$

portanto:

$$S(t) = e^{\alpha_1(t)a_0^\dagger - \alpha_2^*(t)a_0}. \quad (4.3)$$

Os operadores atuam apenas no subespaço  $|n_0\rangle$  (denotado apenas por  $|n\rangle$  em que suprimimos o índice  $q = 0$ ) do espaço de Fock completo  $|n_{q_1}, \dots\rangle$ . Supriremos o índice 0 nos termos que se seguem. Para efetuarmos o cálculo devemos determinar a atuação dos seguintes operadores no estado  $|n\rangle$ :

$$e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t} S(t) |n\rangle = e^{-\eta a^\dagger a t} e^{\alpha_1(t)a^\dagger - \alpha_2^*(t)a} |n\rangle. \quad (4.4)$$

Utilizando a representação de um estado número em termo dos estados coerentes dada na propriedade (2.67), juntamente com as propriedades de estados coerentes discutidas anteriormente podemos mostrar que:

$$e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t} S(t) |n\rangle = \frac{D(\alpha_1 e^{-\eta t}) C_1}{\pi \sqrt{n!}} \int (\alpha^*)^n e^{\left(-1 + \frac{\epsilon - 2\eta t}{2}\right)|\alpha|^2} e^{(\alpha_1^* e^{-2\eta t} - \alpha_2^*)\alpha} |\alpha e^{-\eta t}\rangle d^2\alpha, \quad (4.5)$$

em que:

$$C_1 = \exp\left(\frac{|\alpha_1|^2}{2} e^{-2\eta t} - \frac{\alpha_1 \alpha_2^*}{2}\right). \quad (4.6)$$

Conseqüentemente:

$$\langle n | S^\dagger(t) e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t} = \frac{C_1^*}{\pi\sqrt{n!}} \left[ \int (\nu)^n e^{(-1+\frac{e^{-2\eta t}}{2})|\nu|^2} e^{(\alpha_1 e^{-2\eta t} - \alpha_2)\nu} \langle \nu e^{-\eta t} | d^2\nu \right] D^\dagger(\alpha_1 e^{-\eta t}). \quad (4.7)$$

Com estes resultados calculamos a função de partição  $Z$ , dada por:

$$Z = \sum_n \langle n | e^{-\beta H_0} S^\dagger(t) e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t} e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t} S(t) | n \rangle = \sum_n (e^{-\beta\hbar\omega_0})^n \langle n | S^\dagger(t) e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t} e^{-\frac{1}{\hbar}\Gamma t} S(t) | n \rangle \quad (4.8)$$

O produto interno é dado por:

$$\begin{aligned} \langle \nu e^{-\eta t} | D^\dagger(\alpha_1 e^{-\eta t}) D(\alpha_1 e^{-\eta t}) | \alpha e^{-\eta t} \rangle &= \\ &= \langle \nu e^{-\eta t} | \alpha e^{-\eta t} \rangle = \exp\left(-\frac{|\nu|^2}{2} - \frac{|\alpha|^2}{2} + \nu^* \alpha\right) e^{-2\eta t}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Portanto:

$$Z = \sum_n e^{-\beta\hbar\omega n} \frac{|C_1|^2}{\pi^2 n!} \int (\nu)^n e^{-|\nu|^2 + B_1^* \nu^*} \int (\alpha^*)^n e^{|\alpha|^2 + (B_1 + \nu^* e^{-2\eta t})\alpha} d^2\alpha d^2\nu. \quad (4.10)$$

em que  $B_1 = (\alpha_1^* e^{-2\eta t} - \alpha_2^*)$ . O somatório em  $n$  pode ser facilmente calculado, resultando em uma exponencial. Assim temos:

$$Z = \frac{|C_1|^2}{\pi^2} \int e^{-|\nu|^2 + B_1^* \nu^*} \int e^{|\alpha|^2 + (B_1 + \nu^* e^{-2\eta t})\alpha + (\nu^* e^{-\beta\hbar\omega n})\alpha^*} d^2\alpha d^2\nu. \quad (4.11)$$

A integral acima pode ser calculada utilizando o resultado da integração Gaussiana no plano complexo:

$$\int e^{-A|z|^2 + Bz + Cz^*} d^2z = \frac{\pi e^{\frac{CB}{A}}}{A}, \quad (4.12)$$

e após as integrações obtemos finalmente:

$$Z = \frac{|C_1|^2}{1 - e^{-\beta\hbar\omega - 2\eta t}} \left[ \exp\left(\frac{|B_1|^2 e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega - 2\eta t}}\right) \right]. \quad (4.13)$$

Com a função de partição podemos calcular os valores esperados. Como uma forma mais simples de obter o valor esperado dos operadores de interesse, devemos começar calculando o

valor esperado do operador  $e^{k_2 a^\dagger(t)} e^{k_1 a(t)}$ , onde  $k_1$  e  $k_2$  são parâmetros. Dessa forma o resultado atuará como uma função geradora permitindo o cálculo do valor esperado de sequências de operadores  $a^\dagger$  e  $a$ . Exigindo para isso, somente a derivação da função geradora em relação aos parâmetros e tomando o limite dos mesmos para zero.

O cálculo segue de forma muito similar ao cálculo da função de partição, com uma única diferença em relação à equação (4.9) na qual o operador  $e^{k_2 a^\dagger(t)} e^{k_1 a(t)}$  surge entre o produto interno:

$$\begin{aligned} \langle \nu e^{-\eta t} | D^\dagger(\alpha_1 e^{-\eta t}) e^{k_2 a^\dagger} e^{k_1 a} D(\alpha_1 e^{-\eta t}) | \alpha e^{-\eta t} \rangle = \\ = e^{\left(-\frac{|\nu|^2}{2} - \frac{|\alpha|^2}{2} + \nu^* \alpha\right) e^{-2\eta t} + k_1 e^{-i\omega t} e^{-\eta t} (\alpha + \alpha_1) + k_2 e^{i\omega t} e^{-\eta t} (\nu^* + \alpha_1^*)}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Com exceção da diferença acima, o cálculo segue da mesma forma como anteriormente, e assim temos como resultado:

$$\begin{aligned} G = \langle e^{k_2 a^\dagger(t)} e^{k_1 a(t)} \rangle = e^{(k_1 e^{-i\omega t} \alpha_1 + k_2 e^{i\omega t} \alpha_1^*) e^{-\eta t}} \times \\ \times \exp \left[ \frac{(B_1 k_2 e^{i\omega t} + B_1^* k_1 e^{-i\omega t} + k_1 k_2 e^{-\eta t}) e^{-\beta \hbar \omega - \eta t}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega - 2\eta t}} \right]. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Portanto, os valores esperados dos principais operadores são dados por:

$$\langle a(t) \rangle = \left. \frac{\partial G}{\partial k_1} \right|_{k_1, k_2=0} = \alpha_1 e^{-\eta t} e^{-i\omega t} + \frac{B_1^* e^{-i\omega t} e^{-\beta \hbar \omega - \eta t}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega - 2\eta t}}, \quad (4.16)$$

$$\langle a^\dagger(t) \rangle = \left. \frac{\partial G}{\partial k_2} \right|_{k_1, k_2=0} = \alpha_1^* e^{-\eta t} e^{i\omega t} + \frac{B_1 e^{i\omega t} e^{-\beta \hbar \omega - \eta t}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega - 2\eta t}}, \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} \langle a^\dagger(t) a(t) \rangle = \left. \frac{\partial^2 G}{\partial k_2 \partial k_1} \right|_{k_1, k_2=0} = |\alpha_1|^2 e^{-2\eta t} + \\ + \frac{(B_1^* \alpha_1^* - B_1 \alpha_1 + 1) e^{-\beta \hbar \omega - 2\eta t}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega - 2\eta t}} + \frac{|B_1|^2 e^{-2\beta \hbar \omega - 2\eta t}}{(1 - e^{-\beta \hbar \omega - 2\eta t})^2}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

## 4.2 Dinâmica do campo de spin

Seguindo o mesmo processo realizado na seção (2.6.2) determinamos o comportamento da magnetização. Substituindo os valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  em  $B_1$ , podemos notar que  $B_1 = 0$ .

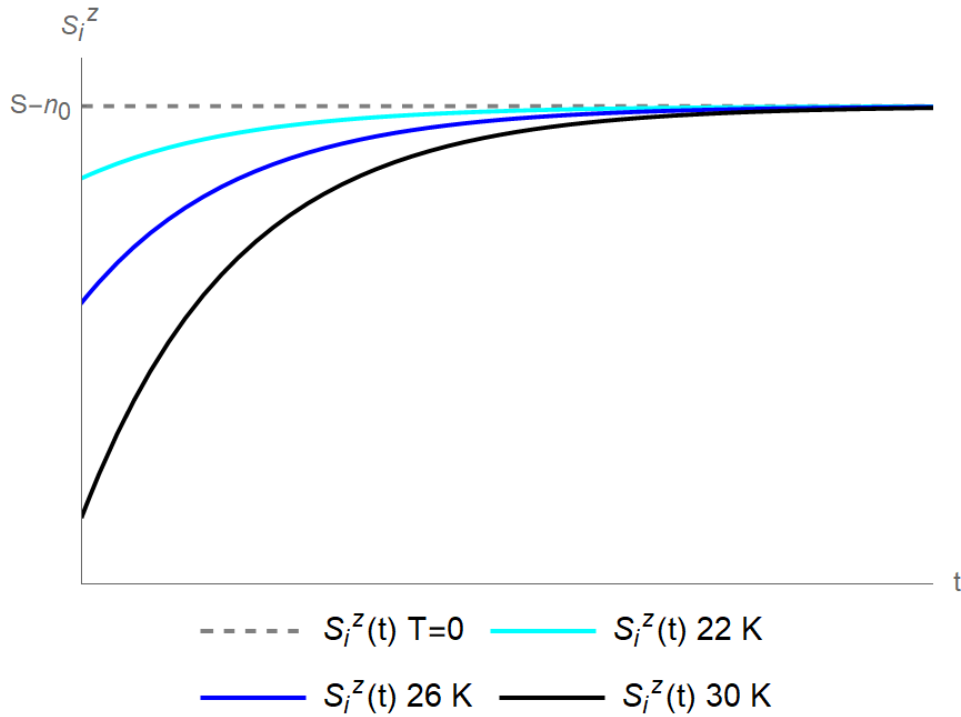


Figura 4.1: O valor de  $S^z$  ao longo do tempo, para temperatura nula e para diferentes temperaturas.

Assim, usando os resultados da seção anterior, obtemos:

$$M^x = \frac{\gamma \hbar}{a^3} \sqrt{2Sn_0} \cos(\varphi - \Omega_{rf}t), \quad (4.19)$$

$$M^y = \frac{\gamma \hbar}{a^3} \sqrt{2Sn_0} \text{sen}(\varphi - \Omega_{rf}t), \quad (4.20)$$

$$M^z = \frac{\gamma \hbar}{a^3} \left[ S - n_0 - n_B \left( \hbar\omega + \frac{2\eta}{\beta} t \right) \right]. \quad (4.21)$$

O valor esperado da magnetização acima pode ser comparado com o modelo sem dissipação descrito na seção (2.7). Repare que os valores de magnetização para o modelo sem dissipação são muito semelhantes aos obtidos com o caso sem dissipação. Notemos que o efeito da dissipação também age sobre a energia térmica do sistema, de forma que no limite  $t \rightarrow \infty$  a distribuição de Bose  $n_B$  para tempos muito longo se anula. Assim obtemos o sistema a temperatura nula, ou seja com a mesma magnetização calculada quando o sistema se encontra em  $T = 0$ . Um gráfico do comportamento da componente  $z$  do spin pode ser encontrado na figura (4.1).

Como os valores de magnetização perpendiculares à direção  $z$  são os mesmos encontrados

em seções anteriores, a suscetibilidade magnética tem a mesma expressão. Para verificar caso o sistema de fato encontra-se em um estado coerente calcularemos se existe *ODLRO*:

$$\langle S_i^x S_j^x \rangle = 2Sn_0 \cos^2(\varphi - \Omega_{rf}t) + \int f_x(q) e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} d^3q, \quad (4.22a)$$

$$\langle S_i^y S_j^y \rangle = -2Sn_0 \sin^2(\varphi - \Omega_{rf}t) + \int f_y(q) e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} d^3q, \quad (4.22b)$$

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \left[ S - n_0 - n_B \left( \hbar\omega + \frac{2\eta}{\beta} t \right) \right]^2 + \int f_z(q) e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} d^3q, \quad (4.22c)$$

Como podemos notar a *ODLRO* existe mesmo para tempos muito longos, nos levando a concluir que os estados coerentes continuam presentes nessa construção que fizemos.

### 4.3 Amplitude de propagação de ondas de Spin

A correlação  $\langle S_i^+(t') S_j^-(t) \rangle$  mede a amplitude do processo de criação de um mágnon em um sítio até a absorção do mesmo em um tempo posterior em um outro sítio, esse cálculo é capaz de nos informar a amplitude de propagação de uma onda de spin ao longo do tempo.

Para efetuarmos esse cálculo precisamos inserir um operador de evolução temporal que leva de um estado no tempo  $t$  para um estado em um tempo posterior  $t'$ . Para obtermos valores esperados de operadores em tempos diferentes, definiremos uma função geradora dada por:

$$G(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega_0 n} \langle n | e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} H^\dagger dt''} e^{\xi_1 a^\dagger} e^{\xi_2 a} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H dt''} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t H^\dagger dt''} e^{\xi_3 a^\dagger} e^{\xi_4 a} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H dt''} | n \rangle. \quad (4.23)$$

Além disso, os termos que possuem as constantes  $\xi_1$  a  $\xi_4$  são as funções que darão à  $G$  a característica de função geradora. Os valores esperados são determinados derivando a função geradora em função dos parâmetros  $\xi$ . A maior dificuldade nesse cálculo existe devido ao operador de evolução temporal de  $t$  a  $t'$  inserido no valor esperado. O restante do cálculo é discutido no apêndice A.

A função de partição é obtida tomando como zero os parâmetros  $\xi$  da função geradora, ou seja  $Z = G(0, 0, 0, 0)$ . A função que devemos derivar para obter os valores esperados é

$G(\xi'_1, \xi'_2, \xi_3, \xi_4)/Z$ , sendo dada por:

$$\begin{aligned} \frac{G(\xi'_1, \xi'_2, \xi_3, \xi_4)}{Z} = \exp & \left[ (\xi'_2 + \xi_4)\alpha_1 e^{-2\eta t} + (\xi'_1 + \xi_3)\alpha_1^* e^{-2\eta t'} - \xi'_1 \xi_3 + \xi'_2(\alpha'_1 - \alpha_2) \right. \\ & + \xi_3(\alpha_1^* - \alpha_2^*) + (\xi'_2 + \xi_4)\alpha_1 e^{-2\eta t} + n_B \left( \hbar\omega + 2\frac{\eta t'}{\beta} \right) \left( (\xi'_2 + \xi_4)(\xi'_1 + \xi_3) \right. \\ & \left. \left. + (\xi'_2 + \xi_4)(\alpha'_1 - \alpha_2 + \alpha_1 e^{-2\eta t} - \alpha'_2 e^{2\eta t'}) + (\xi'_1 + \xi_3)(\alpha_1^* e^{-2\eta t'} - \alpha_2^* - \alpha_1^* - \alpha_2^* e^{2\eta t}) \right) \right], \end{aligned} \quad (4.24)$$

onde  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  são definidos nas equações (4.2) e a linha indica que a grandeza é determinada no tempo  $t'$ . Além disso, as seguintes definições foram feitas:

$$\begin{aligned} \xi'_1 &= \xi_1(t') = \xi_1 e^{i(\omega - i\eta)t'}, \\ \xi'_2 &= \xi_2(t') = \xi_2 e^{-i(\omega - i\eta)t'}, \\ \xi_3 &= \xi_3(t) = \xi_3 e^{i(\omega + i\eta)t}, \\ \xi_4 &= \xi_4(t) = \xi_4 e^{-i(\omega + i\eta)t} \end{aligned} \quad (4.25)$$

A partir da equação (4.24) basta derivarmos a expressão obtida em relação as constantes  $\xi_1$  e  $\xi_3$ , após anularmos as constantes obtemos  $\langle S_i^+(t') S_j^-(t) \rangle$ . A expressão (4.24) é muito útil para obtenção de diversas quantidades de interesse em um trabalho futuro onde daremos continuidade aos resultados deste capítulo.

# Capítulo V

## Conclusão

### 5.1 Análise do modelo

O desenvolvimento da spintrônica certamente exige uma boa compreensão do fenômeno de dissipação de ondas de spin. Este trabalho é um passo nessa direção, a medida que ele descreve uma estratégia para a descrição da dissipação de mágnons. Dispositivos de estados sólidos spintrônicos do futuro terão de lidar com este fenômeno ou podem até depender do mesmo para funcionarem. Apesar da mecânica quântica usual não admitir dissipação em sua formulação usual, métodos foram desenvolvidos para incluir termos dissipativos. Um desses métodos já desenvolvidos é dado pelo modelo de Caldeira-Leggett, entretanto aqui escolhemos o modelo de HNH devido à sua simplicidade e robustez. Motivados por isso, procuramos implementar a dissipação no estudo das ondas de spin. A FMR é a base de funcionamento de vários dispositivos eletrônicos de alta frequência e é possível que no futuro dispositivos spintrônicos se baseiem também neste fenômeno. Portanto, a implementação de nosso estudo no contexto da FMR permite aplicarmos nossos resultados a um problema de relevância em física da matéria condensada.

Enquanto trabalhos anteriores introduziram a dissipação de ondas de spin em modelos quânticos através da substituição  $\omega_0 \rightarrow \omega_0 - i\eta_0$  para o espectro de frequências, aqui fomos capazes de realizar um trabalho mais cuidadoso. Neste trabalho um termo não Hermitiano do tipo  $i\eta a^\dagger a$  inserido à Hamiltoniana de Heisenberg foi capaz de descrever o fenômeno de dissipação de mágnons, reproduzindo os resultados esperados dos experimentos de FMR. Tudo sem adição de outras modificações. Trabalhos recentes mostram a existência de uma equi-

valência entre Hamiltonianas não Hermitianas efetivas (no contexto de sistemas quânticos abertos, ou seja sistemas que interagem com um reservatório térmico) e sistemas de elétrons fortemente correlacionados [33]. Isso nos mostra que esta estratégia pode, talvez, ser equivalente à mecanismos físicos microscópicos reais que dão origem ao fenômeno de dissipação de ondas de spin. Portanto, justificando a necessidade deste modelo mais sofisticado ao invés da simples substituição feita em trabalhos anteriores.

Em um primeiro momento analisamos a aplicação do termo não-Hermitiano no experimento de FMR em temperatura nula, capítulo III. Nesta situação fomos capazes de obter a precessão da magnetização sem inserção de frequências complexas para controlar divergências no modelo. Repetimos a mesma análise em temperatura finita, no capítulo IV, e os resultados se sustentam quando comparados à seção (2.7). Analisamos também a situação para qual o campo de microondas é desligado e, como uma excitação externa está ausente, espera-se que ocorra a relaxação da magnetização. Como verificado na seção (3.4), este caso é perfeitamente descrito pelo modelo, em acordo com a equação fenomenológica LLG. Pode se levantar o questionamento se o termo não-Hermitiano destrói ou não a coerência dos estados, porém como verificado em todos os casos através do cálculo da *ODLRO*, isso não ocorre.

A estratégia de inserção de um termo não-Hermitiano na Hamiltoniana de Heisenberg se mostrou capaz de fornecer um modelo quântico para a dissipação de ondas de spin em temperatura nula assim como os casos com  $T > 0$ . Apesar da existência de um estudo de como HNH podem ser utilizadas para se obter os resultados fenomenológicos da equação LLG [34], não havia ainda um estudo direcionado ao fenômeno de FMR como o desenvolvido aqui. Para elaborarmos este trabalho, foi necessário o desenvolvimento de uma estratégia de cálculo para que pudéssemos obter os resultados utilizando o quadro de interação. Como existe uma dificuldade inerente no tratamento da dissipação em mecânica quântica, os resultados obtidos aqui ajudarão a firmar o método de HNH como uma estratégia viável para a abordagem de dissipação.

# Apêndice A

## Cálculo do valor esperado em tempos distintos

Analisando o operador evolução em tempos diferentes, temos:

$$\begin{aligned}
 & e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} H^\dagger dt''} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t H dt''} = \\
 & = e^{-\frac{iH_0 t'}{\hbar}} e^{-\frac{\Gamma t'}{\hbar}} \left( e^{\frac{\Gamma t'}{\hbar}} e^{\frac{iH_0 t'}{\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} H dt''} \right) \left( e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t H^\dagger dt''} e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{\Gamma t}{\hbar}} \right) e^{\frac{\Gamma t}{\hbar}} e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}}.
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

Utilizando o mesmo processo utilizado para obter a equação (3.12) é possível reconhecer os termos em parênteses como:

$$e^{\frac{\Gamma t'}{\hbar}} e^{\frac{iH_0 t'}{\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} H dt''} = T e^{\alpha_1(t') a^\dagger - \alpha_2^*(t') a}, \tag{1.2a}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t H^\dagger dt''} e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{\Gamma t}{\hbar}} = T e^{-\alpha_2(t) a^\dagger + \alpha_1^*(t) a}. \tag{1.2b}$$

A atuação do operador de ordenamento temporal gera um termo constante e, como esse termo aparece no denominador do cálculo do valor esperado, ele pode ser ignorado. Usaremos daqui em diante a notação com linha para denotar quantidades calculadas no tempo  $t'$  e sem linha para denotar quantidades no tempo  $t$ . Assim a função geradora é dada por:

$$\begin{aligned}
 G & = e^k \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega n} \langle n | S^\dagger(t') e^{-2\frac{\Gamma t'}{\hbar}} e^{\xi_1(t') a^\dagger} \\
 & e^{\xi_2(t') a} e^{(\alpha_1' - \alpha_2) a^\dagger} e^{(\alpha_1^* - \alpha_2') a} e^{\xi_3(t) a^\dagger} e^{\xi_4(t) a} S(t) | n \rangle,
 \end{aligned} \tag{1.3}$$

em que  $k = \frac{\alpha_2(\alpha_2^{*'} - \alpha_1^*)}{2} + \frac{\alpha_2^{*'}(\alpha_2 - \alpha_1)}{2}$  e utilizamos as definições das equações (4.25).  $S(t)$  é dado pela equação (3.12). Utilizando a representação de  $|n\rangle$  dada pela equação (2.67) é fácil mostrar que:

$$S(t)|n\rangle = \int \frac{d^2\alpha}{\pi\sqrt{n!}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2} + \Lambda} (\alpha^*)^n |\alpha_1 + \alpha\rangle, \quad (1.4)$$

e também que

$$\langle n|S(t')e^{-2\frac{\Gamma t'}{\hbar}} = \int \frac{d^2\alpha'}{\pi\sqrt{n!}} e^{-\frac{|\alpha'|^2}{2} + \Lambda^{*'} + \frac{|\alpha'_1 + \alpha'|^2(e^{-4\eta t'} - 1)}{2}} (\alpha'^*)^n \langle (\alpha'_1 + \alpha')e^{-2\eta t'} |, \quad (1.5)$$

onde  $\Lambda = \frac{\alpha_1(\alpha_1^* - \alpha_2^*) + \alpha_1^*\alpha_2 + \alpha_1\alpha_2^*}{2} - \alpha_2^*\alpha_1$ . Em que a linha em  $\alpha'$  tem a função apenas de diferenciá-la da variável de integração  $\alpha$ . De modo a determinar  $G$ , operarmos os operadores da equação (1.3) nos estados, assim obtemos:

$$G = e^{k - (\alpha'_1 - \alpha_2)\xi_2 - (\alpha_2^{*'} - \alpha_1^*)\xi_3 - \xi_2\xi_3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\beta\hbar\omega n} (\alpha'\alpha^*)^n}{n!} \int \frac{d^2\alpha}{\pi} \frac{d^2\alpha'}{\pi} e^{-\frac{|\alpha'|^2}{2} + \Lambda^{*'} - \frac{|\alpha|^2}{2} + \Lambda + \frac{|\alpha'_1 + \alpha'|^2(e^{-4\eta t'} - 1)}{2} + (\xi_1 + \xi_3 + \alpha'_1 - \alpha_2)(\alpha_1^* + \alpha^*)e^{-2\eta t'} - (\xi_2 + \xi_4 + \alpha_2^{*'} - \alpha_1^*)(\alpha_1 + \alpha)} \langle (\alpha'_1 + \alpha')e^{-2\eta t'} | \alpha_1 + \alpha \rangle. \quad (1.6)$$

O somatório em  $n$  na equação acima pode ser facilmente calculado resultado em  $e^{\alpha'\alpha^*e^{-\beta\hbar\omega}}$ . O produto interno entre o *ket* e o *bra* pode ser calculado como na equação (4.9). Dessa forma as integrais em (1.6) podem ser calculadas utilizando a propriedade (4.12). A função de partição  $Z$  é obtida tomando  $\xi_1 = \xi_2 = \xi_3 = \xi_4 = 0$ . Portanto, a razão  $\frac{G}{Z}$  é dada pela equação (4.24).

## Referências Bibliográficas

- [1] Wolf, S. A. et al, *Spintronics: A Spin-Based Eletronics Vision for the Future*, Science Magnetism and Materials, vol. 294, 5546, 1488-1495, 2001;
- [2] Hirohata, A. et al, *Review on spintronics: Principles and device applications*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Volume 509, 166711, 2020;
- [3] Phillips, T. G., Rosenberg, H. M. (1966). *Spin waves in ferromagnets. Reports on Progress in Physics* , 29(1), 285–332;
- [4] Kambersky, V., Patton, C. E. (1975). *Spin-wave relaxation and phenomenological damping in ferromagnetic resonance*, Physical Review B, 11(7), 2668–2672. doi:10.1103/physrevb.11.2668;
- [5] Gilbert, T. L.; *A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials*; IEEE Trans. Mag. 40 (6), 3443–3449; 2004;
- [6] Caldeira, A., Leggett, A. J.; *Influence of dissipation on quantum tunneling in macroscopic systems*; Phys. Rev. Lett.; vol. 46; p. 211; 1981;
- [7] Sparks, M., Loudon, R., Kittel, C. (1961). *Theory of the Relaxation of the Uniform Precession and the Degenerate Spectrum in Insulators at Low Temperatures* , Physical Review, 122(3), 791–803;
- [8] Moiseyev, N.; *Non-Hermitian Quantum Mechanics*; Cambridge University Press; Cambridge; 2011;
- [9] P. D. Mesquita and A. R Moura, *On the dissipative coherent states of magnons*, 5 May 2020, IOP Publishing Ltd, Journal of Physics: Condensed Matter, Volume 32, Number 30;

- [10] Rezende, Sergio M., Zagury, Nicim; *Coherent magnon states*; Physical Review A 29, 47; 1969;
- [11] Mahan, Gerald D.; *Many-particle physics*; Plenum Press; New York, United States; 1990;
- [12] Rössler, U. , *Solid State Theory - An introduction*, Physica-Verlag, Germany, 2009;
- [13] Abrikosov, A. A., *Electron scattering on magnetic impurities in metals and anomalous resistivity effects* , Physics Physique Fizika, vol 2, 1, pg 5–20, 1965;
- [14] Schwinger, J., *On Angular Momentum*, 1952;
- [15] Arovas, Daniel P. and Auerbach, Assa, *Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models*, Phys. Rev. B, 38, 1, 316-332, 1988;
- [16] Lu, Yuan-Ming and Cho, Gil Young and Vishwanath, Ashvin, *Unification of bosonic and fermionic theories of spin liquids on the kagome lattice* , Phys. Rev. B, vol 96, 20, 17, 2017;
- [17] Holstein, T. and Primakoff, H., *Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet*, Phys. Rev., 58, 12, 1098-1113, 1940;
- [18] Glauber, R.J.; *Coherent and incoherent states of radiation field*; Phys. Rev. 131; 2766-2788; 1963;
- [19] Negele, J. W., Orland, H., *Quantum Many-particle Systems* , Westview Press, 1998.
- [20] de Oliveira, F. A. M. and Kim, M. S. and Knight, P. L. and Buek, V., *Properties of displaced number states* , Phys. Rev. A, vol 41, 5, 1990;
- [21] Penrose, O.; CXXXVI. *On the quantum mechanics of helium II*; The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 42, 335, 1373-1377, 1951;
- [22] Yang, C. N.; *Concept of Off-Diagonal Long-Range Order and the Quantum Phases of Liquid He and of Superconductors* Reviews of Modern Physics 34; 694; 1962;
- [23] Annet, J.; *Superconductivity, Superfluids and Condensates*; Oxford, University Press, 2004;

- [24] Rezende, S. M., *Fundamentals of Magnonics*, Springer, vol 969, 2019;
- [25] Zagury, Nicim, Rezende, Sergio M.; *Theory of Macroscopic Excitations of Magnons*; Physical Review B 4, 201; 1971;
- [26] Zagury, Nicim, Rezende, Sergio M.; *On the excitation of coherent magnon states*; Physical Review A 29, 616; 1969;
- [27] Demokritov, S., Demidov, V. et al; *Bose–Einstein condensation of quasi-equilibrium magnons at room temperature under pumping*; Nature 443, 430 ; 2006;
- [28] Demokritov, S., Demidov, V. et al; *Quantum coherence due to Bose–Einstein condensation of parametrically driven magnons*; New Journal of Physics 10, 045029; 2008;
- [29] Bender, Carl M.; Boettcher, Stefan; *Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having PT Symmetry*; Physical Review Letters. 80 (24): 5243–5246;
- [30] Graefe, Eva-Maria, Hoening, M., Korsch, H. J.; *Classical limit of non-Hermitian quantum dynamics - a generalized canonical structure*; J. Phys. A: Math. Theor; 43 7; 2010;
- [31] Qin, H. J. et al; *Long-living terahertz magnons in ultrathin metallic ferromagnets*, Nature Communications, 6, 6126; 2015;
- [32] Auerbach, Assa; *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*; Springer; 1994;
- [33] Michishita, Y., Peters, R.; *Equivalence of Effective Non-Hermitian Hamiltonians in the Context of Open Quantum Systems and Strongly Correlated Electron Systems*; Physical Review Letters, 124, 2020;
- [34] Wieser, R., *Comparison of Quantum and Classical Relaxation in Spin Dynamics*, Physical Review Letters, 110(14), 2013;
- [35] Marder, M., *Condensed Matter Physics* , Jhon Whileuy & Sons, 2 ed, 2010.