

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

Saulo Henrique Santos Silva

**PROPRIEDADES DE TRANSPORTE DE
ENERGIA EM SISTEMAS QUÂNTICOS
ABERTOS:**

Análise da Cadeia XX e do modelo de Ising

Belo Horizonte
2022

Saulo Henrique Santos Silva

**PROPRIEDADES DE TRANSPORTE DE
ENERGIA EM SISTEMAS QUÂNTICOS
ABERTOS:
Análise da Cadeia XX e do modelo de Ising**

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

Orientador: Emmanuel Araújo Pereira
Coorientador: Gabriel Teixeira Landi

Belo Horizonte
2022

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

S586p Silva, Saulo Henrique Santos.

Propriedades de transporte de energia em sistemas quânticos abertos: análise da cadeia XX e do modelo de Ising / Saulo Henrique Santos Silva. – 2022.
160 f. : il.

Orientador: Emmanuel Araújo Pereira.

Coorientador: Gabriel Teixeira Landi.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais,
Departamento de Física.

Bibliografia: f. 109-116.

1. Retificação. 2. Modelo de Ising. 3. Cadeia de spins. 4. Sistemas quânticos. 5. Termodinâmica. I. Título. II. Pereira, Emmanuel Araújo. III. Landi, Gabriel Teixeira. IV. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 536.7(043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

FOLHA DE APROVAÇÃO

A presente tese, intitulada "**Propriedades de transporte de energia em sistemas quânticos abertos: Análise da Cadeia XX e do modelo de Ising**" de autoria de **SAULO HENRIQUE SANTOS SILVA** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **DOUTOR EM CIÊNCIAS**, em dois de dezembro de 2022.

Belo Horizonte, 02 de dezembro de 2022.

Prof. Emmanuel Araújo Pereira
Orientador do estudante
Departamento de Física/UFMG

Prof. Gabriel Teixeira Landi
Coorientador do estudante
IF/USP

Prof. Lucas Lages Wardil
Departamento de Física/UFMG

Profa. Celia Beatriz Anteneodo de Porto
PUC-Rio

Prof. Ronald Dickman
Departamento de Física/UFMG

Prof. Humberto Cesar Fernandes Lemos
DEFM/UFSJ



Documento assinado eletronicamente por **Lucas Lages Wardil, Professor do Magistério Superior**, em 05/12/2022, às 09:46, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Celia Beatriz Anteneodo de Porto, Usuária Externa**, em 05/12/2022, às 11:17, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Emmanuel Araujo Pereira, Membro de comissão**, em 05/12/2022, às 13:02, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Humberto Cesar Fernandes Lemos, Usuário Externo**, em 05/12/2022, às 13:43, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ronald Dickman, Professor do Magistério Superior**, em 06/12/2022, às 09:49, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1939343** e o código CRC **6C37E250**.

Agradecimentos

Primeiramente agradecer a Deus pela oportunidade de estudar suas obras. Meu agradecimento agora é ao meu pai, que está junto com Deus, vendo esta etapa na minha vida sendo concluída. Finalizar esta etapa sem a sua presença foi muito difícil, mas dedico a conclusão a inteiramente a você.

Agradeço a minha mãe por todo suporte, apoio e carinho para seguir com os meus planos e também aos meus irmãos por segurarem a “barra” no momento que mais precisei. Em especial ao meu irmão Wellington, pois ver a sua força me fez ter forças, além de que esta etapa concluída foi junto com o seu suporte desde o meu colégio. Às minhas irmãs Flávia e Erika por todo acolhimento, suporte e carinho.

Agradeço ao meu orientador, Emmanuel Araújo Pereira, primeiramente pela sua amizade durante quase 10 anos. Todo seu ensinamento, na física e na vida, todo suporte que me deu durante minha fase complicada, toda paciência para aguentar os meus “gargalos” e todo impulsionamento que me deu. Me inspiro em você.

Ao meu co-orientador Gabriel Teixeira Landi pelo suporte, conselhos e guia para obter o máximo do trabalho. Seus conhecimentos são infinitos.

Aos meus amigos da física para a vida: Jéssica, Geovani, Marcello, Mario, Diego, Eloy e todos os outros pela amizade.

A minha namorada Pâmela por todo amor, carinho, paz e momentos inesquecíveis. Você mudou completamente minha vida e todos os dias são melhores com você. Te amo!

Muito obrigado a todos!

Resumo

Fenômenos de transporte são um grande desafio que instiga pesquisadores para desvendar os mecanismos microscópicos que regem suas propriedades. O desenvolvimento de dispositivos quânticos e ferramentas teóricas para entender como os sistemas quânticos abertos fora do equilíbrio funcionam tem recebido crescente atenção nos últimos anos e tem demonstrado interessantes propriedades termodinâmicas, as quais carecem de atenção em suas definições para evitar quaisquer contradições físicas. Neste contexto, uma importante e recorrentemente estudada propriedade de transporte, com grande aplicação experimental, é a existência de retificação, ou seja, uma direção preferencial para o fluxo. Nesta presente Tese, visando o entendimento de mecanismos de controle e manipulação de correntes de calor/trabalho/spin e também das propriedades termodinâmicas que sistemas quânticos abertos possuem, realizamos uma investigação detalhada em modelos centrais de estudo através de duas equações mestras na forma de Lindblad, conhecidas como *Local Master Equation* e *Global Master Equation*. Deduzimos a equação local através do Protocolo de Interações Repetidas e aplicamos ao modelo de Ising sujeito a dois tipos de reservatórios nas extremidades, reservatório de *spin* e reservatório *térmico*, com o objetivo de desmembrar a corrente de energia em suas componentes: calor e trabalho. Esta primeira abordagem elucida a consistência termodinâmica que esta derivação possui além de fornecer ferramentas teóricas que regem as correntes de calor e trabalho individualmente. Aplicamos a equação Global, deduzida através do *Weak Coupling Limit Derivation*, à cadeia *XX* juntamente com as transformações de *Jordan-Wigner* com objetivo de deduzir um modelo analítico completo que nos permitiu demonstrar a existência de retificação térmica neste modelo, o qual demonstra ser um excelente retificador com fator de retificação não nulo no limite termodinâmico. Aprofundamos o estudo deste sistema com a presença de *dephasing* no modelo regido pela equação de Lindblad Global visando o entendimento de mecanismos para controlar e manipular correntes de spin. Encontramos que a interação entre *dephasing* e sistemas *graded* promoveu um aumento no fator de retificação da corrente de spin e vimos ainda que quando temos um sistema completamente *graded* é possível controlar o sentido da corrente, deixando que ela flua por um único sentido mesmo com reservatórios invertidos.

Palavras-chave: retificação térmica; sistemas *graded*; modelo de ising; cadeia de spins do tipo *XX*; equação de lindblad; sistemas quânticos abertos; termodinâmica quântica.

Abstract

Transport phenomena are a major challenge that encourages researchers to unravel the microscopic mechanisms that govern its properties. The development of quantum devices and theoretical tools to understand how open quantum systems works out of the equilibrium has received increasing attention in recent years and has demonstrated interesting thermodynamic properties, which lack attention in your definitions to avoid any physical contradictions. In this context, an important and recurrently studied transport property, with great experimental application, is the existence of rectification, that is, a preferential direction for the flow. In this present Thesis, aiming at the understanding of control mechanisms and manipulation of heat/work/spin currents and also the thermodynamic properties that quantum systems have, we carried out a detailed investigation into central models of study through two master equations in Lindblad form, known as Local Master Equation and Global Master Equation. We deduce the Local equation through Repeated Interaction Protocol and applied to the Ising model subject to two types of reservoirs in the ends, spin reservoir and thermal reservoir, in order to dismember the current of energy in its components: heat and work. This first approach elucidates thermodynamic consistency that this derivation has in addition to providing theoretical tools govern heat and work currents individually. We apply the Global equation, deduced through the Weak Coupling Limit Derivation, to the XX chain together with *Jordan-Wigner* transformations in order to deduce an fully analytical model which allowed us to demonstrate the existence of thermal rectification in this model, the which proved to be an excellent rectifier with non-zero rectification factor at the limit thermodynamic. We deepened the study of this system with the presence of dephasing in the model governed by the Lindblad Global equation aiming to understand the mechanisms to control and manipulate spin currents. We found that the interaction between dephasing and graded systems promoted an enhancement in the rectification factor of the spin current and we also saw that when we have a completely graded system it is possible to control the direction of the current, allowing it to flow in a single direction even with inverted reservoirs.

Keywords: thermal rectification; graded systems; ising model; XX spin chain; lindblad equation; open quantum systems; quantum thermodynamics.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	9
2	MODELOS MICROSCÓPICOS	14
2.1	Protocolo de Interações Repetidas (R.I.P.)	14
2.1.1	Propriedades Termodinâmicas	18
2.1.2	Energia e a Equação de Lindblad	20
2.2	Modelo de Ising com banhos de Spins	21
2.2.1	Derivação Microscópica - Dissipadores e Estado Estacionário de não equilíbrio	22
2.3	Modelo de Ising com Banho de Bósons	30
2.3.1	Não unicidade da Equação de Lindblad	35
3	LIMITE DE ACOPLAMENTO FRACO - WEAK COUPLING LIMIT	37
3.1	Derivação Microscópica	37
3.1.1	Retificação térmica - Uma Revisão Bibliográfica	42
3.1.2	A Cadeia XX e Retificação Térmica	43
3.1.3	As Transformações de <i>Jordan-Wigner</i>	44
3.2	Evolução Microscópica e Dissipadores	47
3.2.1	Propriedades do Estado Estacionário de não equilíbrio	55
3.2.2	Correntes de Partículas e Energia	61
3.2.3	Resultados Analíticos - Retificação Térmica da Cadeia XX	65
4	DEPHASING NA CADEIA XX -ANÁLISE DE SISTEMAS GRADUADOS E POTENCIAIS QUASE PERIÓDICOS	72
4.1	Modelo Microscópico	72
4.2	Análise Numérica do <i>NESS</i>	79
4.3	Corrente de Partículas e Corrente de Energia	80
4.4	Análise de Sistemas Graduais (<i>Graded</i>)	85
4.5	Análise de Potenciais Quase Periódicos	91
4.5.1	Aubry-André-Harper	91
4.5.2	Potencial de Fibonnaci	96
5	CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS FUTURAS	107
	REFERÊNCIAS	109

APÊNDICES	117
APÊNDICE A – PROCEDIMENTOS ANALÍTICOS PARA O MO- DELO DE ISING	118
APÊNDICE B – PROCEDIMENTOS ANALÍTICOS PARA A CA- DEIA XX	150

1 Introdução

Sistemas macroscópicos possuem, em geral, a tendência de evoluir para estados cujas propriedades serão determinadas apenas por fatores inerentes ao sistema, independentes, de certa forma, de fatores externos precedentes [1]. Esse estado assintótico que o sistema tende a atingir, é independente do tempo, e pode ser reconhecido como o equilíbrio termodinâmico dependendo do contexto. Mais precisamente, esse é um estado caracterizado pela ausência de fluxos no sistema, sejam de partículas e/ou energia. A descrição microscópica de um sistema termodinâmico em equilíbrio é bem fundamentada e estabelecida. É possível explicar as várias características e propriedades macroscópicas de sistemas em equilíbrio termodinâmico a partir de considerações sobre o comportamento das partículas que os constituem [1].

O postulado fundamental da teoria termodinâmica de equilíbrio estabelece que “em um sistema estatístico fechado, com energia fixa, todas as configurações microscópicas acessíveis são igualmente prováveis”. Esse postulado é justificado a posteriori, por meio de suas consequências. Um argumento a favor do postulado fundamental é o princípio da indiferença [1–3], segundo o qual se podem meramente designar probabilidades iguais a cada possível configuração do sistema na ausência de demais informações. Ou seja, na ausência de razões claras para que algumas configurações sejam mais prováveis que outras. A suposição de probabilidades iguais a priori retrata, de certo modo, nossa ignorância acerca do estado microscópico do sistema.

Muitos fenômenos físicos extremamente interessantes – como transporte de energia em um sistema sujeito a um gradiente de temperatura – envolvem processos irreversíveis fora do equilíbrio. Até o momento, não é conhecido um formalismo exato que se aplique, de modo geral e satisfatório, à termodinâmica de não equilíbrio [4, 5]. Assim, este tema carece de atenção e é uma área ativa e atual de pesquisas. Adicionalmente, o grande avanço das chamadas tecnologias quânticas, introduz dispositivos em escala microscópica onde flutuações de energia são fundamentais para sua descrição [6]. Além disso para entender o comportamento termodinâmico de tais dispositivos é necessário incorporar o efeito de fenômenos quânticos como coerência e correlações não clássicas na descrições dos processos aos quais o sistema está sujeito [7]. Essas ideias abstratas também podem encontrar aplicações práticas em dispositivos quânticos microscópicos [6–11].

O transporte de energia em um sistema submetido a um gradiente de temperatura, é outro exemplo fora do equilíbrio em que a irreversibilidade não pode ser desconsiderada em sua descrição. Fato que pode ser ilustrado pela dedução da lei de Fourier sobre a condução de calor através de primeiros princípios, que ainda é um problema em aberto.

Essa é uma lei fenomenológica enunciada por Joseph Fourier e, apesar de válida para diversos sistemas físicos conhecidos, as condições precisas para a sua validade são, até então, desconhecidas. No contexto clássico considerando uma barra conectada em suas extremidades a dois reservatórios térmicos à diferentes temperaturas, esta lei estabelece que o fluxo de calor, $\mathcal{F}(x, t)$, no ponto x e instante de tempo t é proporcional ao gradiente de temperatura do sistema, ∇T , segundo a relação [12]

$$\mathcal{F}(x, t) = -\kappa(x, T)\nabla T(x, t), \quad (1.1)$$

onde $\kappa(x, T)$ é a condutividade térmica.

O esforço empregado na busca pelas condições precisas para a validação da lei de Fourier, a partir do estudo de modelos simplificados, levou à descoberta de inúmeras propriedades interessantes da condução de calor, algumas com promissoras aplicações práticas experimentais e tecnologicamente relevantes [12–16]. Uma delas é a existência de retificação térmica [17], fenômeno pelo qual a magnitude do fluxo de calor depende do seu sentido, ou seja, quando submetemos um sistema a um gradiente de temperatura o fluxo de calor assume um valor máximo para uma dada configuração do sistema. Em um dado material situado entre dois reservatórios térmicos, por exemplo, diz-se que há retificação quando o módulo da magnitude do fluxo de calor muda ao trocar as temperaturas dos reservatórios ($\Delta T \rightarrow -\Delta T$). A retificação térmica é o ingrediente principal na concepção de dispositivos como diodos térmicos, que já foram inclusive, construídos na prática [18]. Materiais com estrutura *graded*— isto é, materiais cuja estrutura varia gradualmente no espaço — e interações intrincadas (e.g., anarmônicas) são fortes candidatos à construção desses dispositivos [19, 20], motivando o desenvolvimento de diversas investigações, tanto teóricas quanto experimentais, com o propósito de estudar propriedades de sistemas retificadores. Além da possibilidade de obter tais materiais diretamente na natureza, com o avanço da nanotecnologia e das técnicas experimentais relacionadas, atualmente, dispositivos termo-retificadores podem ser fabricados e manipulados quanto às especificidades de suas características para uma dada aplicação. Neste ponto é interessante comentar que a lei de Fourier para a condução de calor não se verifica em algumas situações, como por exemplo, em modelos de osciladores harmônicos com massas constantes ao longo de uma cadeia com interações específicas entre primeiros vizinhos [21–23]. Como mencionado anteriormente entender situações onde a lei de Fourier se aplica ou é quebrada tem grande interesse fundamental e tecnológico e se configura como uma área atual e bastante ativa de pesquisa [24, 25].

Considerando a abordagem de um sistema quântico (descrito pelo operador densidade ρ), quando o mesmo está isolado do meio ambiente (não troca partículas ou calor), sua dinâmica pode ser descrita por, $\partial_t \rho(t) = -i\hbar[H(t), \rho(t)]$ (onde $H(t)$ é o hamiltoniano do sistema). Alguns autores costumam chamar esta situação de sistema quântico fechado por apresentar uma dinâmica descrita por um operador evolução unitário, no entanto,

notamos que energia pode ser inserida ou retirada do sistema através da variação de um campo externo (potencial) associado a dependência temporal do hamiltoniano. Em contrapartida a dinâmica de um sistema aberto, ou seja, um sistema que interage com um ambiente externo é não unitária. Do ponto de vista experimental, nenhum sistema quântico pode ser completamente isolado do seu ambiente externo. Todavia dependendo da janela de tempo em que o experimento é realizado é possível observar dinâmicas bem descritas por uma evolução unitária, i.e., quando o tempo de observação é muito menor que os tempos característicos de decoerência do sistema [26, 27]. De qualquer forma, é fundamental formular a dinâmica de um sistema aberto de forma apropriada. Uma maneira de descrever esta dinâmica não unitária envolvendo a interação do sistema com um ou mais reservatórios térmicos, pode ser através de uma equação mestra quântica [28]. A equação mestra na forma de Lindblad é amplamente utilizada com premissas como homogeneidade no tempo e a validade da aproximação de Markov [28] e pode ser expressa como:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = -i\hbar[H, \rho] + \sum_{k=1}^N \gamma_k \left(A_k \rho A_k^\dagger - \frac{1}{2} \{A_k^\dagger A_k, \rho\} \right), \quad (1.2)$$

onde A_k são os operadores de Lindblad (que descrevem os canais de decoerência) e γ_k são coeficientes que podem ser associados a funções correlação do ambiente [28].

Quando voltamos nossa atenção a sistemas microscópicos, efeitos quânticos podem se tornar importantes e com isso a descrição e manipulação da transferência de energia nesta escala ganha novas nuances e tem recebido atenção crescente nos últimos anos [10, 11, 24, 29, 30]. Além de abordagens teóricas, é interessante citar que o modelo de Heisenberg, que tem papel central em resultados analíticos, pode ser simulado (implementado) experimentalmente de forma controlada em diversos contextos, como exemplo podemos mencionar o estudo do transporte de energia através de sistemas mesoscópicos de atômicos frios aprisionados em redes ópticas [31–35]. Por outro lado, a manipulação coerente de fluxos de energia está no centro da termodinâmica quântica [6], cujos objetivos incluem a compreensão do surgimento de leis termodinâmicas e sua generalização para contextos mais amplos, limites fundamentais para aplicações em tecnologia quântica, projeto de dispositivos térmicos quânticos para aplicações específicas ou que introduzam alguma vantagem quando comparados com seus análogos clássicos, entre outras possibilidades.

No presente trabalho estudaremos duas dinâmicas evolutivas, que serão descritas com mais detalhes nos próximos capítulos, gerando duas equações de Lindblad. Primeiramente o estudo seguirá a dedução da equação de Lindblad via o protocolo de interações repetidas (RIP). Este protocolo vem ganhando destaque nos últimos anos devido a praticidade matemática que apresenta [36, 37]. Brevemente, o RIP consiste em alguns passos: inicialmente o sistema global está em um estado produto dado por $\rho_T(0) = \rho_S \otimes \rho_E$. O sistema total evolui por uma evolução unitária dada por $U = e^{-iH_T t}$, cujo Hamiltoniano total é dado por $H_T = H_S + H_L + H_R + V(t)$, onde $H_S + H_L + H_R$ sendo a soma dos

Hamiltonianos do sistema, banho do lado esquerdo e banho do lado direito e $V(t)$ a interação entre o sistema e os banhos. O ambiente é constituído de dois banhos acoplados pela esquerda e pela direita dados pelos Hamiltonianos (independentes do tempo) $H_{L(R)}$ com temperaturas diferentes e inicialmente no estado de Gibbs. O sistema global é deixado evoluir por um tempo τ e posteriormente é feito um traço parcial sobre os banhos obtendo sistema de interesse ρ_S . Acoplamos novamente dois outros banhos, idênticos aos primeiros, ao sistema anterior e, novamente, deixamos evoluir por um tempo τ . Realiza-se o traço parcial sobre os banhos e todo o procedimento é repetido indefinidamente. Sob algumas condições impostas ao Hamiltoniano total, obtemos uma equação de Lindblad para a evolução do sistema de interesse ρ_S .

Outro modelo estudado na literatura que gera uma nova equação de Lindblad é conhecido como *weak coupling limit*. Neste regime, os reservatórios estão fracamente acoplados no sistema e devido a esta condição, as propriedades termodinâmicas mudam completamente. O processo de derivação da equação de Lindblad consiste em considerar duas aproximações: a aproximação de Born e de Markov, levando ao nome usualmente conhecido como *Born-Markov approximation*. A aproximação de *Born* consiste em dizer que para todo tempo t , temos o estado produto da matriz densidade total: $\rho_T(t) \approx \rho_S \otimes \rho_E$. No processo de dedução invocamos a aproximação de Markov que consiste retirar o efeito de memória na matriz densidade, tomando ela no tempo de estudo t .

Na busca das propriedades termodinâmicas que o sistema possa apresentar, e com isso estudar o fenômeno de retificação, é preciso definir as grandezas termodinâmicas no ponto de vista quântico. No caso de acoplamento fraco (*weak coupling*), na situação usual de um hamiltoniano independente do tempo, nenhum trabalho pode ser realizado no sistema e, portanto, a corrente de energia é puramente uma corrente de calor que é trocado com o banhos. Mas, para o caso de um sistema guiado pela fronteira (*Boundary Driven*), isto é, para cadeias com polarização fixa nas bordas, não temos um processo livre de trabalho, mesmo ao considerarmos um Hamiltoniano independente do tempo. Sendo assim, parte da corrente de energia é devida ao trabalho que todo o processo de derivação traz para o sistema. Essa distinção entre calor e trabalho na corrente de energia é ignorada em vários trabalhos na literatura relacionados a sistemas de spins quânticos, mas é necessário identificar esses dois objetos fundamentais para a consistência das leis termodinâmicas.

Deste modo, aplicaremos estas duas deduções em dois modelos centrais: modelo de Ising e a cadeia XX . O objetivo será estudar a decomposição da corrente de energia para o modelo de Ising, mostrando que mesmo em sistemas mais simples temos a presença de calor e trabalho, pois em alguns sistemas a equação de Lindblad não nos fornece todas as informações. Estudaremos a cadeia XX com o objetivo de encontrar a existência de retificação térmica fazendo um estudo analítico deste fenômeno. A importância física

pertinente nesta análise é mostrar que o fenômeno de retificação térmica aparece para sistemas quânticos relativamente simples, como o caso da cadeia XX , envolvendo apenas interações entre primeiros vizinhos com um Hamiltoniano quadrático. Posteriormente, estudaremos com mais detalhes a cadeia XX na presença de *dephasing* com o objetivo de construir ingredientes para a manipulação eficiente da corrente de spin para além de sistemas *Boundary Driven*. Este modelo será estudado para dois tipos de sistemas amplamente investigados na literatura: sistemas *graded* e potenciais quase-periódicos. Os três estudos serão realizados nos próximos capítulos.

2 Modelos Microscópicos

Recentemente, vemos avanços significativos na abordagem de sistemas quânticos sujeitos a influências externas, mais precisamente os sistemas acoplados em suas bordas a algum tipo de reservatório. Estes reservatórios influenciam o sistema para fora do equilíbrio e deste modo se faz necessário encontrar as equações de movimento da configuração do universo (Sistema+Banho) para poder computar as propriedades de transporte do *NESS* (*Non Equilibrium Steady State*). Estas ferramentas analíticas serão a chave para estudos das correntes e outras propriedades dos fluxos de energia/spin. Sendo assim, nesta parte da Tese nos dedicaremos à derivação destas ferramentas matemáticas e em uma análise minuciosa no modelo de Ising, confirmando as vastas propriedades termodinâmicas que esta derivação apresenta.

2.1 Protocolo de Interações Repetidas (R.I.P.)

Numa formulação canônica da mecânica quântica, um sistema evolui através de uma dinâmica unitária, ou seja, o sistema isolado evolui regido pela equação de von-Neumann:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i\hbar[H, \rho]. \quad (2.1)$$

Entretanto, qualquer sistema físico não está absolutamente isolado do seu ambiente e esta interação leva à troca de grandezas importantes entre os dois sistemas, por exemplo o surgimento de decaimentos e fases aleatórias.

Em muitos casos, obter o estado quântico de um sistema, que está em contato com seu ambiente, em um instante de tempo arbitrário, não é uma tarefa fácil de se resolver e utilizar as técnicas para um sistema isolado não é viável. Portanto, mostra-se útil formular a dinâmica de um sistema aberto por meio de uma equação de movimento apropriada para o seu operador de estado, uma equação mestra quântica.¹

Uma equação amplamente utilizada na literatura para estudar a evolução não unitária do operador de estado de um sistema aberto é a equação de Lindblad, cujas premissas são a homogeneidade do tempo e a validade da condição de Markov (um processo Markoviano é aquele cuja distribuição de probabilidade condicional dos estados futuros depende somente do estado atual, e não dos eventos anteriores). A equação de Lindblad é do tipo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i[H, \rho] + \mathcal{D}(\rho) \quad (2.2)$$

¹ O nome “equação mestra” se deve a Nordsieck, Lamb e Uhlenbeck

onde $\mathcal{D}(\rho)$ é o dissipador da equação, descrevendo a sua não unitariedade. É interessante ressaltar que vários sistemas quânticos que são regidos pela equação de Lindblad foram estudados na literatura. Como exemplo destes sistemas, podemos citar as cadeias de osciladores, descritas nos trabalhos de [38,39], as cadeias spins em contato com reservatórios, descritas nos trabalhos de [39,40] e o processo de decaimento em sistemas de dois níveis, estudado na Ref. [28]. Uma maneira de fazer o sistema quântico ser regido por uma equação de Lindblad é submetê-lo ao processo de interações repetidas (R.I.P). Nos últimos anos, este protocolo vem sendo estudado pela comunidade científica devido a sua praticidade e à possibilidade de se obter resultados analíticos. O aumento do interesse da comunidade acadêmica na construção de uma teoria que trate da termodinâmica de sistemas quânticos abertos, considerar dinâmicas sujeitas ao R.I.P. passou a ser um dos procedimentos paradigmáticos na pesquisa envolvendo sistemas quânticos abertos.

O processo de derivação consiste em seguir as seguintes etapas [41]: inicialmente o sistema global (Sistema + Ambiente) está em um estado produto dado por $\rho_T(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_E$. O universo evolui durante um tempo τ por uma evolução unitária dada por $U = e^{-iH_T\tau}$, cujo Hamiltoniano total é dado pela soma dos Hamiltonianos de cada parte, incluindo a interação entre elas, $H_T = H_S + H_L + H_R + V(t)$, ou seja, a matriz densidade total no tempo τ é dada por $\rho_T(\tau) = e^{-iH_T\tau} \rho_T(0) e^{iH_T\tau}$. Para obtermos o comportamento do nosso sistema de interesse (S) no tempo τ , tomamos o traço parcial sobre os banhos na matriz densidade total: $\rho_S(\tau) = Tr_E\{\rho_T(\tau)\}$. Depois desta evolução temporal, acoplamos novamente o sistema de interesse a novos reservatórios, idênticos aos anteriores, e deixamos evoluir novamente por um tempo τ . Repetimos este procedimento indefinidamente.

Vamos apresentar mais detalhes sobre este processo de derivação. Consideraremos que o estado inicial do ambiente em cada etapa n do R.I.P é um estado de Gibbs, ou seja,

$$\rho_E^n = \omega_\beta^n(H^n) \quad (2.3)$$

$$\omega_\beta^n(H^n) = \frac{e^{-\beta H^n}}{Z}, \quad (2.4)$$

onde $Z = Tr\{e^{-\beta H}\}$ é a função partição. A interação é da forma $V_n = \Theta(t - n\tau)\Theta(n\tau + \tau - t)v/\sqrt{\tau}$, onde a função $\Theta(t)$ é a função de Heavside:

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1, & \text{se } t \geq 0 \\ 0, & \text{se } t < 0 \end{cases} \quad (2.5)$$

ou seja, a interação do sistema com o ambiente é ligada no instante $t = n\tau$ e desligada no instante $t = (n + 1)\tau$.

Para obtermos uma dinâmica Markoviana, tomamos o limite que $\tau \rightarrow 0$ e também assumimos que $Tr_E\{\omega_\beta(H^n)V^n\} = 0$ - fato usado amplamente na literatura [39,41,42]. Observa-se que o limite $\tau \rightarrow 0$ é o que justifica o termo $1/\sqrt{\tau}$ presente na interação, pois numa interação em um intervalo de tempo extremamente pequeno, necessitamos de efeitos

intensos. Ao reescalar o termo da interação com alguma outra potência no tempo resultaria em casos não aceitáveis: uma variação temporal divergente da matriz densidade ou em uma dinâmica que o ambiente não influencia o sistema. A restrição citada neste parágrafo é necessária para que um termo proporcional a $\tau^{1/2}$ se anule no processo de dedução da equação de Lindblad.

O Hamiltoniano do universo a ser estudado, no intervalo de tempo entre $[n\tau, (n+1)\tau)$, é dado por $H_T = H_E + H_S + v/\sqrt{\tau}$ de tal maneira que a matriz densidade no intervalo de tempo $(n+1)\tau$ é escrita:

$$\rho_S[(n+1)\tau] = \text{Tr}_E \{ e^{-iH_T\tau} \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E e^{iH_T\tau} \}. \quad (2.6)$$

Utilizando a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots, \quad (2.7)$$

obtemos:

$$\begin{aligned} \rho_S[(n+1)\tau] &= \text{Tr}_E \left\{ \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E - i\tau [H_T, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E] - \frac{\tau^2}{2} [H_T, [H_T, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E]] + \dots \right\} \\ &= \text{Tr}_E \left\{ \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E - i\tau^{1/2} [v, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E] \right. \\ &\quad \left. - \tau \left(i [H_E + H_S, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E] + \frac{1}{2} [v, [v, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E]] \right) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{O}(\tau^{3/2}) \right\} \\ &= \rho_S(n\tau) - i\tau [H_S, \rho_S(n\tau)] - \frac{\tau}{2} \text{Tr}_E \{ [v, [v, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E]] \} + \mathcal{O}(\tau^{3/2}) \quad . \end{aligned} \quad (2.8)$$

Para dar continuidade à derivação, vamos assumir que o sistema de interesse está submetido a uma interação com o ambiente nas suas extremidades, ou seja, nosso sistema será guiado pelas fronteiras - nomeado na literatura como *Boundary Driven*. Abordaremos aqui uma interação que engloba uma gama de trabalhos envolvendo sistemas quânticos abertos, cuja equação é descrita como [43], $v_i = g_i(A_i^\dagger L_i + A_i L_i^\dagger)$, onde os operadores A_i e o seu conjugado atuam no espaço de Hilbert do respectivo ambiente causando transições de energia entre os seus autoestados:

$$\begin{aligned} A_i |n\rangle &= \alpha_i |(n-1)\rangle \\ A_i^\dagger |n\rangle &= \beta_i |(n+1)\rangle \quad , \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde os autoestados $|n\rangle$ são resultados da equação de autovalor $H_i |n\rangle = \omega_i |n\rangle$. Substituindo estas informações, obtemos:

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_S = & -i[H_S, \rho_S] - \frac{1}{2} \sum_i g_i^2 \left[Tr_E \{ A_i^2 \omega_{\beta_i} \} L_i^\dagger \rho_S + Tr_E \{ A_i A_i^\dagger \omega_{\beta_i} \} L_i^\dagger L_i \rho_S \right. \\
 & + Tr_E \{ A_i^\dagger A_i \omega_{\beta_i} \} L_i L_i^\dagger \rho_S + Tr_E \{ A_i^{\dagger 2} \omega_{\beta_i} \} L_i^2 \rho_S + Tr_E \{ A_i^2 \omega_{\beta_i} \} \rho_S L_i^\dagger \\
 & + Tr_E \{ A_i A_i^\dagger \omega_{\beta_i} \} \rho_S L_i^\dagger L_i + Tr_E \{ A_i^\dagger A_i \omega_{\beta_i} \} \rho_S L_i L_i^\dagger + Tr_E \{ A_i^{\dagger 2} \omega_{\beta_i} \} \rho_S L_i^2 \\
 & \left. - 2 \left[Tr_E \{ A_i^2 \omega_{\beta_i} \} L_i^\dagger \rho_S L_i^\dagger + Tr_E \{ A_i A_i^\dagger \omega_{\beta_i} \} L_i \rho_S L_i^\dagger + Tr_E \{ A_i^\dagger A_i \omega_{\beta_i} \} L_i^\dagger \rho_S L_i \right. \right. \\
 & \left. \left. + Tr_E \{ A_i^{\dagger 2} \omega_{\beta_i} \} L_i \rho_S L_i^\dagger \right] \right].
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Como o estado do ambiente é um estado de Gibbs, utilizando as relações (2.9) e o fato da ortonormalidade dos autoestados do Hamiltoniano, obtemos:

$$\begin{aligned}
 Tr_E \{ A_i^2 \omega_{\beta_i} \} &= \frac{1}{Z_i} Tr_E \{ A_i^2 e^{-\beta_i H_i} \} = \frac{1}{Z_i} \sum_n \langle n | A_i^2 e^{-\beta_i H_i} | n \rangle = \frac{1}{Z_i} \sum_n \langle n | A_i^2 | n \rangle e^{-\beta_i \omega_n^i} \\
 &= \frac{1}{Z_i} \sum_n \alpha_n^i \alpha_n^i \langle n | n - 2 \rangle e^{-\beta_i \omega_n^i} = 0
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

Podemos aplicar a dedução acima para o operador A_i^\dagger , cujo resultado também é nulo. Agrupando os resultados obtidos, a equação diferencial para a matriz densidade do sistema fica:

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_S = & -i[H_S, \rho_S] - \frac{1}{2} \sum_i \left[\gamma_i^- \left(L_i^\dagger L_i \rho_S + \rho_S L_i^\dagger L_i - 2 L_i \rho_S L_i^\dagger \right) + \gamma_i^+ \left(L_i L_i^\dagger \rho_S + \rho_S L_i L_i^\dagger - 2 L_i^\dagger \rho_S L_i \right) \right] \\
 = & -i[H_S, \rho_S] + \sum_i \left[\gamma_i^- \left(L_i \rho_S L_i^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_i^\dagger L_i, \rho_S \} \right) + \gamma_i^+ \left(L_i^\dagger \rho_S L_i - \frac{1}{2} \{ L_i L_i^\dagger, \rho_S \} \right) \right] \\
 = & -i[H_S, \rho_S] + \sum_i \mathcal{D}_i(\rho_S) \quad ,
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

onde fizemos as seguintes definições:

$$\begin{aligned}
 \gamma_i^+ &\equiv \langle A_i^\dagger A_i \rangle g_i^2, \\
 \gamma_i^- &\equiv \langle A_i A_i^\dagger \rangle g_i^2, \\
 \mathcal{D}_i(\rho) &\equiv \gamma_i^- \mathcal{L}[L_i, \rho] + \gamma_i^+ \mathcal{L}[L_i^\dagger, \rho], \\
 \mathcal{L}[A, \rho] &\equiv A \rho A^\dagger - \frac{1}{2} \{ A^\dagger A, \rho \}.
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

Note que estamos estudando sistemas guiados pela fronteira, como consequência o índice i presente nos somatórios da demonstração da equação de Lindblad percorre apenas dois valores, os quais chamaremos a partir de agora de L e R , referindo ao ambiente acoplado pela esquerda e pela direita, respectivamente.

Sendo assim, vemos que submeter um sistema ao protocolo de interações repetidas (R.I.P.), com banhos nas extremidades (facilmente generalizado para banhos em todos os sítios) e interação dada por $v = g(AL^\dagger + A^\dagger L)$ entre o sítio da extremidade e seu ambiente, resulta em uma dinâmica regida pela equação de Lindblad.

2.1.1 Propriedades Termodinâmicas

O nosso universo de estudo será composto por um sistema quântico e ambiente (banho) com Hamiltoniano dado por $H_S(t)$ e H_E , e um potencial de interação $V(t)$. Vamos definir a energia interna do sistema por [36]:

$$E(t) \equiv Tr\{\rho(t)[H_S(t) + V(t)]\} \quad . \quad (2.14)$$

Note que os fluxos de energia ocorrem em intervalos de tempo definidos pelo processo de interações repetidas. Sendo $W(t)$ o trabalho realizado sobre o sistema e $Q(t)$ o calor que flui para o sistema, ambos no intervalo de tempo $[0, t]$, temos, a partir da primeira lei da termodinâmica, a seguinte expressão:

$$\Delta E(t) \equiv W(t) + Q(t) \quad . \quad (2.15)$$

Sendo que o Hamiltoniano do ambiente é constante no tempo e utilizando a expressão (2.15), toda variação de energia do ambiente é dada em forma de calor, portanto podemos escrever:

$$Q(t) \equiv -Tr\{H_E[\rho_T(t) - \rho_T(0)]\}, \quad (2.16)$$

onde $\rho_T(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_E$. Através de (2.16) vemos que o calor que flui para o sistema é menos a variação da energia interna do ambiente.

As correntes de calor e trabalho oriundas do R.I.P podem ser calculadas similarmente ao feito para a matriz densidade. No intervalo de tempo $[n\tau, (n+1)\tau)$ a quantidade de calor que o sistema recebe do ambiente é dada por:

$$\Delta Q_i = -(\langle H_i^n \rangle_\tau - \langle H_i^n \rangle_0), \quad (2.17)$$

onde $\langle H_i^n \rangle_t = Tr_E\{H_i \rho_E^n(t)\}$ e $\rho_E^n(t) = Tr_S\{e^{-iH_T t} \rho_S(n\tau) \otimes \omega_{\beta_i} e^{iH_T t}\}$. Novamente, utilizando a expressão de Baker-Campbell-Hausdorff obtemos:

$$\begin{aligned} \langle H_i^n \rangle_\tau &= \langle H_i^n \rangle_0 + i\tau^{1/2} Tr_S\{\rho_S(n\tau) Tr_E\{[v_i^n, H_i] \omega_{\beta_i}\}\} \\ &\quad - \frac{\tau}{2} Tr_S\{\rho_S(n\tau) Tr_E\{[v_i^n, [v_i^n, H_i]] \omega_{\beta_i}\}\}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Assim como fizemos anteriormente, vamos considerar uma interação do tipo $v = g(AL^\dagger + A^\dagger L)$ de tal maneira que o termo proporcional a $\tau^{1/2}$ se anule devido a restrição usual $\langle [H_i, A] \rangle = -\omega \langle A \rangle = 0$. Temos a seguinte expressão:

$$\Delta Q_i = \frac{\tau}{2} Tr \{ \rho_S Tr \{ [v_i^n, [v_i^n, H_i]] \omega_{\beta_i} \} \} + \mathcal{O}(\tau^{3/2}) \quad , \quad (2.19)$$

que no limite em que $\tau \rightarrow 0$, chegamos em

$$\dot{Q}_i = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\Delta Q_i}{\tau} \quad (2.20)$$

$$\dot{Q}_i = \frac{1}{2} Tr \{ [v_i, [v_i, H_i]] \rho_S \otimes \omega_{\beta_i} \} = -Tr \left\{ \left(v_i H_i v_i - \frac{1}{2} \{ v_i^2, H_i \} \right) \rho_S \otimes \omega_{\beta_i} \right\}. \quad (2.21)$$

Tendo em vista o processo de dedução da equação de Lindblad, vemos que é realizado trabalho sobre o sistema, pois realizamos um ato de “ligar” e “desligar” o sistema da interação com o ambiente em cada intervalo de tempo. Para computarmos o trabalho realizado sobre o sistema nesta etapa, precisamos considerar um efeito de borda devido à dependência temporal da interação sistema-ambiente, e portanto estudar no intervalo de tempo $[n\tau - \epsilon, (n+1)\tau - \epsilon]$ no limite em que $\epsilon \rightarrow 0$. Portanto, o trabalho em cada etapa do R.I.P é dado por [36, 41, 42]:

$$\Delta W = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{n\tau - \epsilon}^{(n+1)\tau - \epsilon} Tr \{ \rho_T(t) \dot{V}(t) \} \quad , \quad (2.22)$$

onde no intervalo de interesse da integral, $\dot{V} = \delta(t - n\tau)(V_n - V_{(n-1)})$ e, portanto

$$\Delta W = Tr \{ \rho_T(n\tau)(V_n - V_{(n-1)}) \} \quad . \quad (2.23)$$

Note que até o instante de tempo $n\tau$ temos $Tr \{ V_n \rho_T(n\tau) \} = 0$, pois o ambiente está no estado de Gibbs, e após a interação com o sistema podemos ter $Tr \{ V_n \rho_T(n\tau) \} \neq 0$. Usando (2.7), temos

$$\begin{aligned} \Delta W &= \sum_i \Delta W_i = - \sum_i \frac{\{ v_i^{n-1} \}_{n\tau}}{\sqrt{\tau}} = - \sum_{i=L,R} Tr \left\{ \frac{v_i^{n-1}}{\sqrt{\tau}} e^{-iH_T \tau} \rho_S[(n-1)\tau] \otimes \rho_E^{n-1} e^{iH_T \tau} \right\} \\ &= - \sum_i Tr \left\{ \left(\frac{v_i^{n-1}}{\sqrt{\tau}} + i\tau^{1/2} [v_i^{n-1}, H_S + H_i] + \frac{\tau}{2} [v_i, [v_i^{n-1}, H_S + H_i]] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \mathcal{O}(\tau^{3/2}) \right) \rho_S[(n-1)\tau] \otimes \rho_E^{n-1} \right\} \quad . \end{aligned} \quad (2.24)$$

Fazendo $\dot{W} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \Delta W / \tau$ encontramos a expressão final para o trabalho no R.I.P:

$$\begin{aligned} \dot{W} &= -\frac{1}{2} \sum_i Tr \{ [v_i, [v_i, H_S + H_i]] \rho_S \otimes \omega_{\beta_i} \} \\ &= Tr \left\{ v_i \left(H_S + H_i \right) v_i - \frac{1}{2} \{ v_i^2, H_S + H_r \} \right\} \rho_S \otimes \omega_{\beta_i} \quad . \end{aligned} \quad (2.25)$$

Vemos que ao submeter o sistema ao R.I.P, conseguimos obter informações sobre as componentes da energia do sistema de acordo com a primeira lei da termodinâmica. Veremos no decorrer do texto as aplicações pertinentes destas equações, pois uma abordagem ingênua de qual processo o sistema foi submetido pode gerar incoerências físicas.

2.1.2 Energia e a Equação de Lindblad

Na seção anterior, vimos que podemos obter toda informação termodinâmica de um sistema que foi submetido ao processo de interação repetidas, ou seja, se sabemos *a priori* que o sistema foi submetido ao R.I.P, podemos utilizar as equações obtidas anteriormente para calcular a corrente de calor e a corrente de trabalho que flui para o sistema.

Neste ponto podemos fazer um questionamento relevante sobre o uso da equação de Lindblad e a informação que ela passa sobre o sistema. Sabemos que esta equação nos fornece informações somente sobre o estado do sistema, então através dela podemos calcular a variação da energia interna deste:

$$\dot{E} = \frac{d}{dt} \langle H_S \rho_S \rangle = Tr_S \left\{ H_S \left[-i[H_S, \rho_S] + \mathcal{D}(\rho_S) \right] \right\} = Tr [H_S \mathcal{D}(\rho_S)] \quad . \quad (2.26)$$

Através de (2.8) vemos que o termo que dá origem ao dissipador da equação de Lindblad é proporcional a τ :

$$\mathcal{D}(\rho_S) = -\frac{1}{2} Tr_E [v, [v, \rho_S \otimes \rho_E]] .$$

Aplicando as propriedades do traço, obtemos:

$$\begin{aligned} \dot{E} &= Tr_S \left\{ H_S \left(-\frac{1}{2} Tr_E [v, [v, \rho_S \otimes \rho_E]] \right) \right\} = Tr_S \left\{ H_S Tr_E \left(v \rho_S \otimes \rho_E v - \frac{1}{2} \{v^2, \rho_S \otimes \rho_E\} \right) \right\} \\ &= Tr \left\{ H_S \left(v \rho_S \otimes \rho_E v - \frac{1}{2} \{v^2, \rho_S \otimes \rho_E\} \right) \right\} = Tr \left\{ \left(v H_S v - \frac{1}{2} \{v^2, H_S\} \right) \rho_S \otimes \rho_E \right\} \\ &= -\frac{1}{2} Tr \{ [[v, [v, H_S]] \} = \dot{E}_{R.I.P} \quad . \end{aligned} \quad (2.27)$$

Concluimos então que o balanço energético obtido através do R.I.P está consistente com a equação de Lindblad. Portanto, vemos que desde que o universo seja submetido a este processo, conseguimos aprofundar o estudo termodinâmico aplicado ao sistema, fato que não é possível somente com a equação de Lindblad sem saber *a priori* sobre qual processo microscópico o sistema foi submetido.

O fato de não estudar o processo microscópico ao qual o sistema foi submetido pode levar em análises equivocadas das grandezas termodinâmicas. Como exemplo, em um

artigo recente de Levy e Kosloff [43] com centenas de citações é feita uma crítica sobre as equações de Lindblad locais que estamos estudando (*boundary-driven*). É possível mostrar, com algumas considerações, que energia poderia fluir de uma fonte fria para uma quente, aparentemente violando a segunda lei da termodinâmica. Entretanto, Levy e Kosloff e outros autores fizeram uso da equação de Lindblad com justificativas fenomenológicas, sem fazer referência à qual o processo o sistema passou, tal que esse obedeça uma equação de Lindblad. Neste ponto encontramos a raiz do problema, pois vemos que a equação de Lindblad não contém toda a informação do sistema/vizinhança. Em trabalhos mais recentes, que aqui podemos citar Barra [36], Pereira [42] e De Chiara [39], essa aparente confusão é esclarecida, uma vez que através de uma dinâmica microscópica, o R.I.P, fica evidente que calor só pode fluir de uma fonte fria para uma fonte quente quando é realizado trabalho sobre o sistema, configurando assim um regime de refrigeração usual da termodinâmica.

Impulsionado pelas informações termodinâmicas que o R.I.P pode nos oferecer, vamos estudar analiticamente dois modelos nas próximas seções com o objetivo de desdobrar a corrente de energia em suas componentes de calor e trabalho.

- Modelo de Ising acoplado a reservatório de spins
- Modelo de Ising acoplado a reservatório bosônico.

2.2 Modelo de Ising com banhos de Spins

Nesta primeira análise, estuda-se o sistema quântico aberto unidimensional constituído de uma cadeia de Ising com N sítios (partículas de spin $1/2$) sujeita a um reservatório de spin em cada extremidade e a um campo magnético externo de valor B . A Figura 1 ilustra essa configuração, os reservatórios atuam somente no primeiro e último spin da cadeia (*boudary driven*):

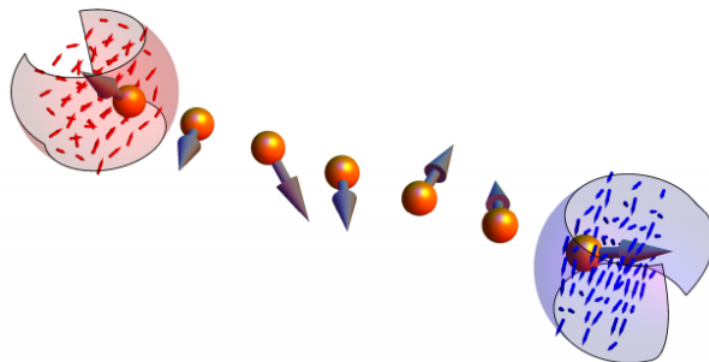


Figura 1 – Representação de um sistema submetido a reservatórios de spins na extremidade. Figura retirada de [44]

Naturalmente, quando conectamos os reservatórios ao sistema de estudo, este é retirado do equilíbrio e torna-se relevante saber qual o estado assintótico do sistema. Se os reservatórios forem desbalanceados, isto é, tiverem intensidades diferentes ($f_L \neq f_R$), eles induzirão polarizações diferentes em cada extremidade e isto fará com que o sistema evolua para um estado de não equilíbrio. Ainda assim, no limite de tempos longos, o sistema chegará a um estado estacionário de não equilíbrio (NESS), de modo similar ao que ocorre quando ligamos dois reservatórios térmicos, um quente e um frio, às extremidades de uma barra. Este estado é caracterizado pela presença de fluxos, que nesta tese focaremos no fluxo de energia resultante do processo para mostrar que não temos um processo livre de trabalho.

O modelo de Ising é o modelo mais simples para se estudar as propriedades magnéticas. A interação presente entre os spins neste modelo é somente em uma componente (σ_z). Apesar de sua simplicidade, continua sendo um modelo amplamente estudado na literatura [10, 11, 45]. Como aplicações, podemos observar simulações em redes óticas e também para descrever alguns compostos.

O Hamiltoniano deste modelo é dado por:

$$H_S = - \sum_i J_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \sum_i B_i \sigma_i^z \quad , \quad (2.28)$$

onde os coeficientes J_i e B_i correspondem à intensidade de interação entre os sítios vizinhos e o campo externo aplicados no sítio i , respectivamente. Podemos estudar algumas situações interessantes: quando $B = 0$, se $J_i > 0$, temos ordenamento ferromagnético e, se $J_i < 0$, temos ordenamento antiferromagnético. Note que esse Hamiltoniano pode ser obtido através de um modelo mais complexo, chamado de modelo XXZ , dado pela expressão abaixo, tomando o limite $\Delta \rightarrow \infty$. O modelo de Ising apresenta solução exata via transformadas de Jordan-Wigner, a qual abordaremos com mais detalhes nos próximos capítulos. Segue a expressão do Hamiltoniano para o modelo XXZ :

$$H = \sum_i \left\{ J_i \left(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \right) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right\} \quad .$$

2.2.1 Derivação Microscópica - Dissipadores e Estado Estacionário de não equilíbrio

Seguindo os passos do protocolo, vamos derivar expressões fundamentais para prosseguir com a análise do modelo de Ising. Os banhos aos quais o sistema será submetido são descritos pelos seguintes Hamiltonianos:

$$\begin{aligned} H_L &= \frac{h_L}{2} \sigma_L^z \\ H_R &= \frac{h_R}{2} \sigma_R^z \quad , \end{aligned} \quad (2.29)$$

note que, deste modo, estamos fixando a magnetização média nos extremos da cadeia cujos valores serão dados por

$$\begin{aligned} f_L &= \langle \sigma_L^z \rangle = -\tanh(\beta_L H_L) \\ f_R &= \langle \sigma_R^z \rangle = -\tanh(\beta_R H_R) \quad . \end{aligned} \quad (2.30)$$

Os banhos serão acoplados à cadeia pelos sítios 1 e N através da interação usual, já comentada, do tipo

$$V_{L(R)} = \alpha_{L(R)} (\sigma_{1(N)}^x \sigma_{L(R)}^x + \sigma_{1(N)}^y \sigma_{L(R)}^y) \quad , \quad (2.31)$$

onde α é a intensidade do acoplamento entre o sistema e o banho. Com estas informações, podemos escrever o Hamiltoniano total do modelo microscópico:

$$H_T = H_S + \frac{h_L}{2} \sigma_L^z + \frac{h_R}{2} \sigma_R^z + V_L + V_R \quad . \quad (2.32)$$

Continuando a aplicar os passos do protocolo, necessitamos calcular a evolução temporal da matriz densidade que inicialmente está no estado produto, é dada pela equação de Von-Neumann:

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

Após o procedimento descrito pelas equações (2.6), (2.7) e (2.8) temos no limite em que $\tau \rightarrow 0$ a expressão final para o dissipador no R.I.P

$$\mathcal{D}(\rho_S) = -\frac{1}{2} \text{Tr}_E [v, [v, \rho_S \otimes \rho_E]] \quad ,$$

onde a interação foi reescalada com a dependência temporal em τ

$$V_{L(R)} = \frac{v}{\sqrt{\tau}} = \sqrt{\frac{\gamma_{L(R)}}{\tau}} (\sigma_{1(N)}^x \sigma_{L(R)}^x + \sigma_{1(N)}^y \sigma_{L(R)}^y) \quad . \quad (2.33)$$

A forma final de cada dissipador pode ser calculada utilizando das expressões acima em conjunto com (2.13), a qual nos fornece o valor das constantes $\gamma_i^{+(-)}$. Este cálculo consiste em analisar cuidadosamente os traços que envolvem as interações L e R , cujo resultado é apresentado abaixo:

$$\mathcal{D}_L(\rho) = X_L^+ \left[\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - \frac{1}{2} \{ \sigma_1^- \sigma_1^+, \rho \} \right] + X_L^- \left[\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_1^+ \sigma_1^-, \rho \} \right] \quad (2.34)$$

$$\mathcal{D}_R(\rho) = X_R^+ \left[\sigma_N^+ \rho \sigma_N^- - \frac{1}{2} \{ \sigma_N^- \sigma_N^+, \rho \} \right] + X_R^- \left[\sigma_N^- \rho \sigma_N^+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_N^+ \sigma_N^-, \rho \} \right] \quad , \quad (2.35)$$

onde $\rho \equiv \rho_S$, $X_{L(R)}^+ = 2\gamma_{L(R)}(1 + f_{L(R)})$ e $X_{L(R)}^- = 2\gamma_{L(R)}(1 - f_{L(R)})$.

Tendo como inspiração alguns trabalhos na literatura [10, 11] aplicaremos as equações deduzidas no modelo de Ising descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{h_i}{2} \sigma_i^z + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\Delta_{i,i+1}}{2} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \frac{\Delta_{1,N}}{2} \sigma_1^z \sigma_N^z \quad . \quad (2.36)$$

Este modelo já é estudado na literatura com a derivação microscópica via acoplamento fraco (*weak coupling limit*), derivação que abordaremos com mais detalhes nos próximos capítulos, e alguns resultados para esta abordagem mostraram a existência de retificação perfeita para uma junção ($N = 2$) [11] e, para cadeias maiores, ocorre retificação perfeita desde que haja uma interação de longo alcance envolvendo o primeiro e último spin da cadeia [10]. Nestes dois casos, a corrente de energia é puramente de calor. O objetivo agora é estudar via R.I.P o desdobramento da corrente de energia em corrente de calor e de trabalho no modelo de Ising:

$$\frac{d}{dt} H(t) = \sum_r \dot{Q}_r + \sum_r \dot{W}_r \quad . \quad (2.37)$$

Apesar de parecer uma derivação livre de trabalho, todo o processo do protocolo leva trabalho ao sistema e isto reside no fato de acoplar e desacoplar o sistema ao reservatório entre um tempo $n\tau$ e $(n+1)\tau$.

Aplicaremos uma abordagem analítica para sistemas compostos de 2 e 3 sítios. No texto principal mostraremos os resultados principais e todas as contas detalhadas podem ser acompanhadas no apêndice A.

- *Junção Quântica: Caso $N=2$*

Para este sistema, conhecido também como junção, o Hamiltoniano é descrito pela seguinte expressão:

$$H_S = \frac{h_1}{2} \sigma_1^z + \frac{h_2}{2} \sigma_2^z + \frac{\Delta_{1,2}}{2} \sigma_1^z \sigma_2^z \quad .$$

De acordo com as expressões deduzidas para a corrente de calor e a corrente de trabalho, dadas por (2.21) e (2.25), escrevemos:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{L(R)} &= \frac{1}{2} \left\langle [v_{L(R)}, [v_{L(R)}, H_{L(R)}]] \right\rangle \\ \dot{W}_{L(R)} &= -\frac{1}{2} \left\langle [v_{L(R)}, [v_{L(R)}, H_{L(R)} + H_S]] \right\rangle \quad . \end{aligned} \quad (2.38)$$

O cálculo destas grandezas é feito analisando minuciosamente os valores esperados dos comutadores presentes nas expressões. Este cálculo apesar de ser simples, é extenso e para deixar o texto principal organizado mostraremos o resultado final, contudo todos os detalhes algébricos podem ser encontrados no apêndice A. Chegamos nas seguintes expressões para as correntes:

$$\dot{Q}_{L(R)} = 2\gamma_{L(R)}h_{L(R)} \left[f_{L(R)} - Tr_S \sigma_{1(2)}^z \rho \right] \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} \dot{W}_{L(R)} = & 2\gamma_{L(R)}h_{1(2)} \left[f_{L(R)} - Tr_S \sigma_{1(2)}^z \rho \right] - 2\gamma_{L(R)}h_{L(R)} \left[f_{L(R)} - Tr_S \sigma_{1(2)}^z \rho \right] \\ & - 2\gamma_{L(R)}\Delta_{1,2} Tr_S \sigma_1^z \sigma_2^z \rho + 2\gamma_{L(R)}\Delta_{1,2} f_{L(R)} Tr_S \sigma_{2(1)}^z \rho \quad . \end{aligned} \quad (2.40)$$

Neste ponto do procedimento analítico notamos que para obter as expressões exatas para as componentes da energia, temos que resolver a equação de Lindblad formada pelos dissipadores em (2.34) e (2.35). Vamos considerar uma solução para ρ na forma diagonal cuja base ortonormal são os autoestados do Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |--\rangle \\ |2\rangle &= |-+\rangle \\ |3\rangle &= |+-\rangle \\ |4\rangle &= |++\rangle \quad , \end{aligned} \quad (2.41)$$

com esta escolha [11] fazemos com que tanto ρ quanto H sejam diagonalizáveis por essa base, portanto $[H, \rho] = 0$. Basta agora solucionar a seguinte equação de Lindblad:

$$\frac{d\rho_{jj}}{dt} = 0 = \mathcal{D}_L(\rho)_{jj} + \mathcal{D}_R(\rho)_{jj} \quad . \quad (2.42)$$

Através das expressões para os dissipadores descritas em (2.34) e (2.35), obtemos um sistema de equação linear para as quatro componentes da matriz densidade:

$$\begin{aligned} 0 &= -(X_L^+ + X_R^-)\rho_{22} + X_R^+\rho_{11} + 0 + X_L^-\rho_{44} \\ 0 &= X_R^-\rho_{22} - (X_L^+ + X_R^+)\rho_{11} + X_L^-\rho_{33} + 0 \\ 0 &= 0 + X_L^+\rho_{11} - (X_L^- + X_R^+)\rho_{33} + X_R^-\rho_{44} \\ 0 &= X_L^+\rho_{22} + 0 + X_R^+\rho_{33} - (X_L^- + X_R^-)\rho_{44} \quad . \end{aligned} \quad (2.43)$$

Note que a solução deste sistema não é independente, pois a matriz densidade tem a propriedade de ter traço unitário. Deste modo, temos uma quinta equação para solucionar em conjunto com (2.42):

$$\sum_i \rho_{ii} = 1 \quad .$$

O resultado obtido representa a solução diagonal pra a matriz densidade:

$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{X_R^- X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{X_R^+ X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{X_R^- X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{X_R^+ X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} \end{bmatrix}$$

Com o estado estacionário de não equilíbrio (NESS) em mãos, podemos calcular explicitamente os valores das correntes de calor e trabalho. Isto é feito calculando os valores médios das componentes σ_1^z e σ_2^z :

$$\begin{aligned} Tr_S \sigma_1^z \rho &= f_L \\ Tr_S \sigma_1^z \sigma_2^z \rho &= f_L f_R \\ Tr_S \sigma_2^z \rho &= f_R \quad . \end{aligned} \tag{2.44}$$

Substituindo estes valores nas expressões (2.39) e (2.40), encontramos o resultado final:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{L(R)} &= 0 \\ \dot{W}_{L(R)} &= 0 \quad . \end{aligned} \tag{2.45}$$

Concluimos que o modelo de Ising com reservatórios de spin, para o caso $N = 2$, a corrente de energia, que é dada por $\dot{E} = \dot{Q}_L + \dot{W}_L + \dot{Q}_R + \dot{W}_R$, é nula. O resultado obtido é mais profundo, pois vemos que com as definições termodinâmicas obtidas através do protocolo de interações repetidas, expressões dadas por (2.21) e (2.25), a corrente de energia é nula devido a cada componente ser nula, ou seja, as correntes de calor e trabalho se anulam individualmente.

- *Sistema composto de 3 spins*

Estudaremos agora um sistema ligeiramente mais complexo devido a presença do spin do meio, o qual faz o papel de “*bulk*” da cadeia. Para este sistema o Hamiltoniano é dado por:

$$H_S = \frac{h_1}{2} \sigma_1^z + \frac{h_2}{2} \sigma_2^z + \frac{h_3}{2} \sigma_3^z + \frac{\Delta_{1,2}}{2} \sigma_1^z \sigma_2^z + \frac{\Delta_{2,3}}{2} \sigma_2^z \sigma_3^z + \frac{\Delta_{1,3}}{2} \sigma_1^z \sigma_3^z$$

Note que foi adicionado uma interação de longo alcance envolvendo o primeiro e o terceiro spin, tendo em vista os estudos recentes envolvendo esta cadeia. Foi apresentado em [10] que para se ter uma corrente não nula de calor² é necessário ter uma interação de longo alcance envolvendo apenas os spins das extremidades. Para o nosso modelo, não restringimos as interações $\Delta_{i,i+1}$, podendo assumir quaisquer valores.

² Neste trabalho, corrente de energia é igual a corrente de calor

O procedimento para o cálculo das correntes de calor e trabalho é idêntico ao realizado para o caso $N = 2$. Note que as expressões (2.21) e (2.25) são derivadas utilizando os extremos da cadeia, portanto chegamos novamente nas seguintes expressões para \dot{Q} e \dot{W} :

$$\dot{Q}_{L(R)} = 2\gamma h_{L(R)} \left[f_{L(R)} - Tr^S \sigma_{1(N)}^z \rho \right] \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} \dot{W}_{L(R)} = & 2\gamma_{L(R)} h_{1(3)} \left[f_{L(R)} - Tr^S \sigma_{1(3)}^z \rho \right] - 2\gamma_{L(R)} h_{L(R)} \left[f_{L(R)} - Tr^S \sigma_{1(3)}^z \rho \right] \\ & - 2\gamma_{L(R)} \Delta_{1(2),2(3)} Tr^S \sigma_{1(2)}^z \sigma_{2(3)}^z \rho + 2\gamma_{L(R)} \Delta_{1(2),2(3)} f_{L(R)} Tr^S \sigma_2^z \rho \\ & - 2\gamma \Delta_{1,3} Tr^S \sigma_1^z \sigma_3^z \rho + 2\gamma_{L(R)} \Delta_{1,3} f_{L(R)} Tr^S \sigma_{3(1)}^z \rho \quad . \end{aligned} \quad (2.47)$$

onde temos um termo extra envolvendo a interação entre os spins dos extremos.

Assim como anteriormente, estudaremos um estado estacionário na forma diagonal para solucionar a equação de Linblad. Utilizaremos como base os autoestados do Hamiltoniano de Ising:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= | - + - \rangle & |2\rangle &= | - - - \rangle \\ |3\rangle &= | - - + \rangle & |4\rangle &= | - + + \rangle \\ |5\rangle &= | + + - \rangle & |6\rangle &= | + - - \rangle \\ |7\rangle &= | + - + \rangle & |8\rangle &= | + + + \rangle \quad . \end{aligned}$$

Devido ao fato do número de variáveis crescer com 2^N , através de (2.42) obtemos dois conjuntos de 4 equações lineares para as componentes de ρ :

Grupo 1 para as componentes $\rho_{11}, \rho_{22}, \rho_{55}, \rho_{66}$

$$\begin{aligned} 0 &= -(X_L^+ + X_R^-) \rho_{22} + X_R^+ \rho_{11} + 0 + X_L^- \rho_{66} \\ 0 &= X_R^- \rho_{22} - (X_L^+ + X_R^+) \rho_{11} + X_L^- \rho_{55} + 0 \\ 0 &= 0 + X_L^+ \rho_{11} - (X_L^- + X_R^+) \rho_{55} + X_R^- \rho_{66} \\ 0 &= X_L^+ \rho_{22} + 0 + X_R^+ \rho_{55} - (X_L^- + X_R^-) \rho_{66} \quad , \end{aligned} \quad (2.48)$$

Grupo 2 para as componentes $\rho_{33}, \rho_{44}, \rho_{77}, \rho_{88}$:

$$\begin{aligned}
0 &= -(X_L^+ + X_R^-)\rho_{44} + X_R^+\rho_{33} + 0 + X_L^-\rho_{88} \\
0 &= X_R^-\rho_{44} - (X_L^+ + X_R^+)\rho_{33} + X_L^-\rho_{77} + 0 \\
0 &= 0 + X_L^+\rho_{33} - (X_L^- + X_R^+)\rho_{77} + X_R^-\rho_{88} \\
0 &= X_L^+\rho_{44} + 0 + X_R^+\rho_{77} - (X_L^- + X_R^-)\rho_{88} \quad ,
\end{aligned} \tag{2.49}$$

ressaltamos que as contas para obter os sistemas lineares estão detalhadas no apêndice A.

O procedimento de resolução é similar ao realizado anteriormente. Vemos que estes grupos de equações possuem uma analogia com os índices do sistema linear para o caso com $N = 2$. Sendo assim, utilizando novamente que $\sum_i \rho_{ii} = 1$, chegamos em uma relação para as componentes dos dois sistemas:

$$\rho_{22} + \rho_{44} = \frac{X_R^+ X_L^-}{16} . \tag{2.50}$$

No processo de solução do sistema, que pode ser acompanhado no apêndice A, o valor das componentes da matriz ficam sujeitas ao valor da primeira variável de cada grupo de equações, ou seja, as componentes $\rho_{11}, \rho_{55}, \rho_{66}$ são resolvidas em termos de ρ_{22} e as componentes $\rho_{33}, \rho_{77}, \rho_{88}$ ficam solucionadas em termo de ρ_{44} .

Para generalizar o resultado, vamos supor que as componentes acima são diferentes, de tal modo que seja válida a relação (2.50):

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_{22} = \alpha_1 \rho \quad \rho_{44} = \alpha_2 \rho \\ \alpha_1 \rho + \alpha_2 \rho = \frac{X_R^+ X_L^-}{16} \\ \rho = \frac{1}{(\alpha_1 + \alpha_2)} \frac{X_R^+ X_L^-}{16} \end{array} \right. . \tag{2.51}$$

Portanto, vemos que a matriz densidade resultante fica escrita como:

$$\rho = \begin{bmatrix} \nu_1 \frac{X_R^- X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \nu_1 \frac{X_R^+ X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu_2 \frac{X_R^- X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \nu_2 \frac{X_R^+ X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu_1 \frac{X_R^- X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu_1 \frac{X_R^+ X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu_2 \frac{X_R^- X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu_2 \frac{X_R^+ X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} \end{bmatrix}$$

onde temos que:

$$\nu_{1(2)} = \frac{\alpha_{1(2)}}{\alpha_1 + \alpha_2} \quad ,$$

com α_i constantes positivas.

Deste modo, generalizamos o resultado da matriz densidade no estado estacionário de não equilíbrio de tal modo que para todos valores de α_1 e α_2 restritos a $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$, conseguimos abranger infinitos estados estacionários na forma diagonal.

Com a matriz densidade em mãos, podemos calcular os valores das correntes de calor e trabalho dadas por (2.46) e (2.47). Como feito anteriormente os valores finais são dados resolvendo cuidadosamente os traços de cada operador, de tal modo que encontramos:

$$\begin{aligned} Tr^s \sigma_1^z \rho &= f_L \\ Tr^s \sigma_1^z \sigma_2^z \rho &= f_L \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \right) \\ Tr^s \sigma_2^z \sigma_3^z \rho &= f_R \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \right) \\ Tr^s \sigma_3^z \rho &= f_R \\ Tr^s \sigma_1^z \sigma_3^z \rho &= f_R f_L \quad . \end{aligned}$$

Com estes resultados, obtemos que

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{L(R)} &= 0 \\ \dot{W}_{L(R)} &= 0 \quad , \end{aligned}$$

para qualquer configuração da matriz densidade na forma diagonal.

Novamente encontramos uma corrente nula de energia, mas com cada componente se anulando individualmente.

- *Conclusão*

Concluimos que o modelo de Ising com reservatórios de spin, tanto para o caso $N = 2$, quanto para o caso $N = 3$, a corrente de energia é nula. Note que o fato da nulidade do valor da corrente é devido exclusivamente ao fato das componentes se anularem individualmente. Mesmo permitindo que as constantes de interação do Hamiltoniano fossem livres, ou seja, o sistema pode ter qualquer tipo de interação entre as componentes de spin, não foi um fator determinante para o valor da corrente de energia. Sendo assim, vemos que modelo microscópico constituído por um Hamiltoniano de Ising em conjunto com reservatórios de spins, evoluído através do R.I.P se comporta similarmente a um efeito de blindagem da corrente de energia.

2.3 Modelo de Ising com Banho de Bósons

Estudaremos agora o modelo microscópico envolvendo um banho de bósons e o Hamiltoniano de Ising. A motivação acerca desta abordagem reside no fato de que, especificamente para este banho com derivação via *weak coupling*, o modelo de Ising apresenta resultados interessantes envolvendo retificação de energia [10, 11]. Estamos interessados em conhecer as propriedades termodinâmicas deste modelo microscópico evoluído via protocolo de interações repetidas.

O acoplamento de cada banho de osciladores harmônicos com o sistema é dado pela interação *spin-boson* com a componente σ_x :

$$H_{spin-bath}^{L(R)} = \sigma_x^{1(N)} g_{L(R)} \left(a^{L(R)} + a^{L(R)\dagger} \right) \quad , \quad (2.52)$$

cujos Hamiltonianos dos reservatórios são dados por:

$$H_{bath}^{L(R)} = \omega_{L(R)} \left(a^{L(R)\dagger} a^{L(R)} \right) \quad , \quad (2.53)$$

onde $a^{\dagger L(R)}$ e $a^{L(R)}$ são os operadores de criação e aniquilação de modos bosônicos. Este modelo implica que os banhos só podem promover trocas de um único spin por vez, sempre sendo o primeiro ou o último spin da cadeia, portanto transições envolvendo mais de um spin são proibidas. Para realizar o estudo das propriedades termodinâmicas provenientes deste tipo de banho temos que deduzir uma expressão para a equação de Lindblad. Note que a interação é do tipo $v = g(AL^\dagger + LA^\dagger)$, podemos escrever:

$$v_{L(R)} = g_{L(R)} \sigma_{1(N)}^x (a_{L(R)}^\dagger + a_{L(R)}) \quad . \quad (2.54)$$

Utilizando a expressão geral para os dissipadores - visto em (2.8) - obtemos a seguinte equação de Lindblad:

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H_S, \rho] + (\gamma_L^- + \gamma_L^+) (\sigma_1^x \rho \sigma_1^x - \rho) + (\gamma_R^- + \gamma_R^+) (\sigma_2^x \rho \sigma_2^x - \rho) \quad , \quad (2.55)$$

com $\gamma_{L(R)}^- = (1 + n_{L(R)}) g_{L(R)}^2$ e $\gamma_{L(R)}^+ = n_{L(R)} g_{L(R)}^2$ onde $n_{L(R)}$ é a distribuição de Bose-Einstein:

$$n_{L(R)} = \frac{1}{e^{\omega_{L(R)} \beta_{L(R)}} - 1} \quad . \quad (2.56)$$

Estudaremos a evolução deste modelo microscópico via R.I.P em sistemas compostos por $N = 2$ e $N = 3$ spins com o objetivo de obter as correntes de calor e trabalho que são produzidas através desta evolução.

- *Junção Quântica: Caso $N=2$*

Para este primeiro sistema, o Hamiltoniano de interesse é descrito pela seguinte expressão:

$$H_S = \frac{h_1}{2}\sigma_1^z + \frac{h_2}{2}\sigma_2^z + \frac{\Delta_{1,2}}{2}\sigma_1^z\sigma_2^z \quad ,$$

onde h_1 e h_2 são campos magnéticos externos aplicado na componente σ_z e $\Delta_{1,2}$ é a constante de interação entre os spins.

Para calcular as correntes de calor e trabalho necessitamos resolver novamente as expressões gerais obtidas no começo do capítulo:

$$\dot{Q}_{L(R)} = \frac{1}{2} \left\langle [v_{L(R)}, [v_{L(R)}, H_{L(R)}]] \right\rangle \quad (2.57)$$

$$\dot{W}_{L(R)} = -\frac{1}{2} \left\langle [v_{L(R)}, [v_{L(R)}, H_{L(R)} + H_S]] \right\rangle \quad . \quad (2.58)$$

O cálculo é feito similarmente ao modelo microscópico anterior, cujo passo a passo pode ser acompanhado no apêndice B. Encontramos:

$$\dot{Q}_{L(R)} = -g_{L(R)}^2 \omega_{L(R)} \eta$$

$$\dot{W}_{L(R)} = g_{L(R)}^2 \omega_{L(R)} - 2g_{L(R)}^2 h'_{1(2)} (2n_{L(R)} + 1) Tr^S(\sigma_{1(2)}^z \rho) - 2g_{L(R)}^2 \Delta'_{1,2} (2n_{L(R)} + 1) Tr^S(\sigma_1^z \sigma_2^z \rho) \quad ,$$

onde as constantes de campo magnético e de interações foram reescaladas apenas com o objetivo de organização da expressão final:

$$\begin{aligned} \Delta'_{i,j} &= \frac{\Delta_{i,j}}{2} \\ h'_i &= \frac{h_i}{2} \quad . \end{aligned}$$

Note que a corrente de calor apresenta um valor constante e independe do estado estacionário de não equilíbrio (NESS) do sistema, portanto esta expressão já nos fornece um valor diferente de zero para uma das componentes da corrente de energia.

Na busca de encontrar o valor da corrente de trabalho, vamos considerar novamente um *NESS* na forma diagonal cuja base ortonormal, assim como foi feito anteriormente, serão os estados das componentes σ_z do Hamiltoniano

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |--\rangle \\ |2\rangle &= |-\rangle \\ |3\rangle &= |+\rangle \\ |4\rangle &= |++\rangle \quad , \end{aligned} \quad (2.59)$$

de tal modo que resolveremos a equação de Lindblad:

$$\frac{d\rho_{jj}}{dt} = 0 = \mathcal{D}_L(\rho)_{jj} + \mathcal{D}_R(\rho)_{jj} \quad .$$

A matriz densidade é obtida resolvendo o sistema linear para as suas componentes, de tal modo que encontramos um conjunto de equações similar a (2.43):

$$\begin{aligned} 0 &= -(\alpha_L + \alpha_R)\rho_{11} + \alpha_R\rho_{22} + \alpha_L\rho_{33} + 0 \\ 0 &= \alpha_R\rho_{11} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{22} + 0 + \alpha_L\rho_{44} \\ 0 &= \alpha_L\rho_{11} + 0 - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{33} + \alpha_R\rho_{44} \\ 0 &= 0 + \alpha_L\rho_{22} + \alpha_R\rho_{33} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{44} \quad , \end{aligned} \tag{2.60}$$

onde $\alpha_{L(R)} = \gamma_{L(R)}^- + \gamma_{L(R)}^+$. Devido a condição entre as componentes de ρ ,

$$\sum_i \rho_{ii} = 1 \quad ,$$

encontramos a matriz densidade no *NESS* dada por:

$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \quad .$$

Substituindo os valores encontrados nas expressões para as correntes, encontramos os valores finais:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{L(R)} &= -g_{L(R)}^2 \omega_{L(R)} \\ \dot{W}_{L(R)} &= g_{L(R)}^2 \omega_{L(R)} \quad , \end{aligned}$$

ou seja, o fluxo de energia é zero ($\dot{E} = \dot{Q} + \dot{W}$), mas temos correntes de calor e trabalho diferentes de zero. Portanto, em contrapartida com os resultados na literatura atribuindo corrente de energia como corrente de calor [43] para sistema guiados pela fronteira (*Boundary-Driven*), vemos a presença de calor e trabalho fornecendo resultados coerentes com a segunda lei da termodinâmica. Deste modo, mostramos que apenas a análise da equação de Lindblad não nos fornece toda a informação termodinâmica do sistema.

- *Sistema composto de 3 spins*

Assim como foi feito para o reservatório de spins, estenderemos o tamanho da cadeia para o modelo envolvendo o reservatório bosônico para um sistema composto de 3 spins, cujo Hamiltoniano é dado por:

$$H_S = \frac{h_1}{2}\sigma_1^z + \frac{h_2}{2}\sigma_2^z + \frac{h_3}{2}\sigma_3^z + \frac{\Delta_{1,2}}{2}\sigma_1^z\sigma_2^z + \frac{\Delta_{2,3}}{2}\sigma_2^z\sigma_3^z + \frac{\Delta_{1,3}}{2}\sigma_1^z\sigma_3^z.$$

Observamos anteriormente que existe a presença de uma corrente de calor intrínseca para este modelo microscópico, independente do estado estacionário de não equilíbrio. Sendo assim, investigaremos o comportamento da corrente de trabalho:

$$\dot{W}_{L(R)} = -\frac{1}{2}\langle [v_{L(R)}, [v_{L(R)}, H_{L(R)} + H_{S'}]] \rangle - \frac{1}{2}\langle [v_{L(R)}, [v_{L(R)}, H]] \rangle, \quad (2.61)$$

onde definimos os novos Hamiltonianos como:

$$\begin{aligned} H_{S'} &= \frac{h_1}{2}\sigma_1^z + \frac{h_2}{2}\sigma_2^z + \frac{\Delta_{1,2}}{2}\sigma_1^z\sigma_2^z \\ H &= \frac{h_3}{2}\sigma_3^z + \frac{\Delta_{2,3}}{2}\sigma_2^z\sigma_3^z + \frac{\Delta_{1,3}}{2}\sigma_1^z\sigma_3^z \end{aligned}$$

ou seja,

$$H_S = H_{S'} + H \quad .$$

Comparando com o processo realizado para $N = 2$, vemos que a nova expressão para o trabalho envolve o cálculo de um novo termo dado por $-1/2\langle [v_{L(R)}, [v_{L(R)}, H]] \rangle$. Para proceder com o cálculo é conveniente redefinir novamente as constantes presentes no Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \Delta'_{i,j} &= \frac{\Delta_{i,j}}{2} \\ h'_i &= \frac{h_i}{2}, \end{aligned}$$

com os cálculos apresentados no apêndice B, escrevemos:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{L(R)} &= -g_{L(R)}^2\omega_{L(R)} \\ \dot{W}_{L(R)} &= g_{L(R)}^2\omega_{L(R)} - 2g_{L(R)}^2h'_{1(3)}(2n_{L(R)} + 1)Tr^s(\sigma_{1(3)}^z\rho) - \\ &\quad - 2g_{L(R)}^2\Delta'_{1(2),2(3)}(2n_{L(R)} + 1)Tr^S(\sigma_{1(2)}^z\sigma_{2(3)}^z\rho) - 2g_{L(R)}^2\Delta'_{1,3}Tr^S\sigma_1^z\sigma_3^z\rho \quad . \end{aligned}$$

Para o cálculo da matriz densidade no estado estacionário, vamos supor novamente uma forma diagonal,

$$\frac{d\rho_{jj}}{dt} = 0 = \mathcal{D}_L(\rho)_{jj} + \mathcal{D}_R(\rho)_{jj} \quad ,$$

cujas bases são dadas pelos auto-estados do modelo de Ising:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= | - + - \rangle & |2\rangle &= | - - - \rangle \\
 |3\rangle &= | - - + \rangle & |4\rangle &= | - + + \rangle \\
 |5\rangle &= | + + - \rangle & |6\rangle &= | + - - \rangle \\
 |7\rangle &= | + - + \rangle & |8\rangle &= | + + + \rangle .
 \end{aligned}$$

Através desta expressão, obtemos um conjunto de 8 equações para os elementos da matriz densidade. É fácil verificar que podemos separar este sistema em 2 grupos de 4 equações:

Grupo 1 para as componentes $\rho_{11}, \rho_{22}, \rho_{55}, \rho_{66}$

$$\begin{aligned}
 0 &= -(\alpha_L + \alpha_R)\rho_{11} + \alpha_R\rho_{22} + \alpha_L\rho_{55} + 0 \\
 0 &= \alpha_R\rho_{11} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{22} + 0 + \alpha_L\rho_{66} \\
 0 &= \alpha_L\rho_{11} + 0 - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{55} + \alpha_R\rho_{66} \\
 0 &= 0 + \alpha_L\rho_{22} + \alpha_R\rho_{55} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{66} .
 \end{aligned}$$

Grupo 2 para as componentes $\rho_{33}, \rho_{44}, \rho_{77}, \rho_{88}$:

$$\begin{aligned}
 0 &= -(\alpha_L + \alpha_R)\rho_{33} + \alpha_R\rho_{44} + \alpha_L\rho_{77} + 0 \\
 0 &= \alpha_R\rho_{33} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{44} + 0 + \alpha_L\rho_{88} \\
 0 &= \alpha_L\rho_{33} + 0 - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{77} + \alpha_R\rho_{88} \\
 0 &= 0 + \alpha_L\rho_{44} + \alpha_R\rho_{77} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{88} .
 \end{aligned}$$

Novamente impondo a propriedade da matriz densidade, $\sum_i \rho_{ii} = 1$, encontramos:

$$\begin{aligned}
 \rho_I = \rho_{11} = \rho_{22} = \rho_{55} = \rho_{66} &= \frac{\gamma_1}{4(\gamma_1 + \gamma_2)} \\
 \rho_{II} = \rho_{33} = \rho_{44} = \rho_{77} = \rho_{88} &= \frac{\gamma_2}{4(\gamma_1 + \gamma_2)} ,
 \end{aligned} \tag{2.62}$$

onde $\gamma_{1(2)} > 0$.

Com os valores de ρ_{ii} calculados acima, vemos que as correntes de calor e trabalho assumem:

$$\begin{aligned}
 \dot{Q}_{L(R)} &= -g_{L(R)}^2 \omega_{L(R)} \\
 \dot{W}_{L(R)} &= g_{L(R)}^2 \omega_{L(R)} ,
 \end{aligned} \tag{2.63}$$

para qualquer escolha da matriz densidade ρ na forma diagonal com $\gamma_1 + \gamma_2 = 1$. Assim como anteriormente, para qualquer que seja o estado estacionário de não equilíbrio, desde que diagonal e restrito a (2.62), temos a presença de calor e trabalho no sistema.

- *Conclusão*

Nesta seção estudamos o modelo microscópico composto pelo modelo de Ising (2.28) submetido ao reservatório bosônico (2.53). Através da evolução via R.I.P, concluímos que este modelo possui corrente de calor e corrente de trabalho diferentes de zero, mas de tal modo que a soma ($\dot{E}_{L(R)} = \dot{Q}_{L(R)} + \dot{W}_{L(R)}$) é nula. Fazendo todos os procedimentos analíticos, observamos que independente das interações presentes no Hamiltoniano do sistema, encontramos o desdobramento da primeira lei da termodinâmica em calor e trabalho, portanto aqui vemos a importância de se conhecer a qual tipo de evolução submetemos o sistema em estudo, pois a equação de Lindblad não nos fornece toda a informação termodinâmica do sistema.

2.3.1 Não unicidade da Equação de Lindblad

Neste capítulo do trabalho, dedicamos o estudo a uma dedução microscópica emergente e por muitas vezes mal interpretada fisicamente. Vimos que as equações de Lindblad locais nos fornecem todas as propriedades termodinâmicas relevantes para o estudo da corrente de energia. Um ponto muito importante que podemos salientar neste capítulo é que diferentes configurações do universo, ou seja, diferentes reservatórios dos quais usamos no processo do R.I.P, podem resultar na mesma equação de Lindblad. Podemos observar ainda que a não unicidade da equação de Lindblad pode fornecer diferentes valores para o calor inserido e trabalho realizado sobre o sistema, para uma mesma equação mestra. De fato, podemos tomar como exemplo as equações (2.30), (2.34) e (2.35):

$$f_L = \langle \sigma_L^z \rangle = -\tanh(\beta_L H_L) \quad (2.64)$$

$$f_R = \langle \sigma_R^z \rangle = -\tanh(\beta_R H_R),$$

vamos supor que existam outros reservatórios, tais que $H'_{L(R)} = \kappa H_{L(R)}$, cujas temperaturas são escaladas como $\beta'_{L(R)} = \beta_{L(R)}/\kappa$. Neste novo sistema encontramos:

$$f'_L = \langle \sigma'_L{}^z \rangle = -\tanh(\beta'_L H'_L) \quad (2.65)$$

$$f'_R = \langle \sigma'_R{}^z \rangle = -\tanh(\beta'_R H'_R) \quad ,$$

ora, substituindo os novos valores, temos o resultado final




$$f'_{L(R)} = -\tanh(\beta'_{L(R)} H'_{L(R)}) = -\tanh\left(\frac{\beta_{L(R)}}{\kappa} \kappa H_{L(R)}\right) = f_{L(R)} \quad . \quad (2.66)$$

Sendo assim, fica claro que $X_{L(R)}^+ = 2\gamma_{L(R)}(1 + f'_{L(R)}) = X_{L(R)}$, ou seja, obtemos o mesmo dissipador para uma nova dinâmica microscópica. Note que com esses novos valores de campo magnético e de temperatura implicam em diferentes valores para as componentes da energia, fato que pode ser visto nas equações (2.39) e (2.40) cujos valores dependem explicitamente dos valores do campo magnético.

Um trabalho mais aprofundado no modelo XXZ realizado pelos membros do grupo Luiz Henrique Teixeira Reis e Emmanuel Araujo Pereira, mostrou que de fato temos diferentes comportamentos termodinâmicos para a cadeia XXZ (refrigerador, aquecedor e motor térmico) e também diferentes valores para \dot{Q} e \dot{W} , mas a mesma energia final. Tendo realizado esta minuciosa análise no modelo de Ising e todos os resultados extremamente relevantes no modelo XXZ , unimos nossos resultados que foram publicados na revista *Physical Review E* - DOI: 10.1103/PhysRevE.101.062107, cujo *abstract* segue abaixo:

PHYSICAL REVIEW E **101**, 062107 (2020)

**Beyond the Lindblad master equation: Heat, work, and energy currents
in boundary-driven spin chains**

Luís H. Reis , Saulo H. S. Silva , and Emmanuel Pereira 

Departamento de Física–Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, CP 702, 30.161-970 Belo Horizonte MG, Brazil



(Received 13 January 2020; accepted 18 May 2020; published 1 June 2020)

We consider accurate investigation of the energy current and its components, heat and work, in some boundary-driven quantum spin systems. The expressions for the currents, as well as the associated Lindblad master equation, are obtained via a repeated interaction scheme. We consider small systems in order to analytically compute the steady distribution to study the current in the steady state. Asymmetrical XXZ and quantum Ising models are detailed analyzed. For the XXZ chain we present cases in which different compositions of heat and work currents, obtained via the repeated interaction protocol, lead to the same energy current, which may be obtained via the Lindblad master equation. For the quantum Ising chain, we describe a case of zero energy current and nonvanishing heat and work currents. Our findings make clear that to talk about heat in these boundary-driven spin quantum systems we must go beyond an investigation involving only the Lindblad master equation.

DOI: [10.1103/PhysRevE.101.062107](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.101.062107)

Figura 2 – Artigo publicado com os resultados para o modelo de Ising e a cadeia XXZ .

3 *Limite de Acoplamento fraco - Weak Coupling Limit*

Vamos agora estudar uma segunda derivação da equação mestra na forma de Lindblad, muito utilizada no estudo de sistemas quânticos abertos [10,11,46,47]. Seguiremos a análise apresentada em [28]. É interessante ressaltar que para um sistema acoplado passiva e fracamente à reservatórios, a equação mestra que derivaremos a seguir nos fornecem todas as propriedades termodinâmicas deste sistema, as quais, nesse processo de derivação, são diferentes das propriedades apresentadas no capítulo anterior, cujo sistema está acoplado ao ambiente ativamente. Neste caso, quando temos um Hamiltoniano independente do tempo, a corrente de energia é puramente corrente de calor.

3.1 Derivação Microscópica

Consideraremos a evolução microscópica de um sistema quântico S acoplado fracamente com o reservatório E . O Hamiltoniano total é dado por:

$$\mathcal{H}_T = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_E + \mathcal{H}_I \quad (3.1)$$

onde \mathcal{H}_I é o Hamiltoniano de interação entre o sistema e o seu ambiente, \mathcal{H}_S é o Hamiltoniano do sistema quântico de interesse e \mathcal{H}_E é o Hamiltoniano do reservatório. O espaço de Hilbert do universo será representado pelo produto tensorial $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$, onde consideramos tanto o Hamiltoniano do reservatório quanto o do sistema independentes do tempo. Escrevendo a evolução temporal da matriz densidade, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_T = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_S + \mathcal{H}_E + \mathcal{H}_I, \rho_T] \quad (3.2)$$

As derivações que se seguem são feitas de maneira mais conveniente na figura de interação entre $\mathcal{H}_S + \mathcal{H}_E$. Definiremos o Hamiltoniano dado por

$$H_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\mathcal{H}_S + \mathcal{H}_E)t} \mathcal{H}_I e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{H}_S + \mathcal{H}_E)t} \quad (3.3)$$

e para o operador densidade

$$\rho(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\mathcal{H}_S + \mathcal{H}_E)t} \rho_T e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{H}_S + \mathcal{H}_E)t} \quad (3.4)$$

Portanto, a nova equação para $\rho(t)$ assume

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i [H_I(t), \rho(t)] \quad (3.5)$$

$$\rho(t) = \rho(0) - i \int_0^t [H(t'), \rho(t')] dt'$$

onde, lembrando, a interação é fraca. Fazendo uma interação entre as equações (3.5), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) = & i [H_I(t), \rho(t)] - \\ & - i \left[H_I(t), \int_0^t [H_I(t'), \rho(t')] dt' \right] . \end{aligned} \quad (3.6)$$

Estamos interessados na evolução temporal do sistema, sendo assim é necessário retirar a informação dos reservatórios na evolução temporal global. Isto é feito tomando o traço parcial sobre os reservatórios, $\rho_S(t) = Tr_E\{\rho(t)\}$. Realizando o traço, obtemos:

$$\frac{d\rho_S}{dt} = -i \int_0^t ds Tr_E \{ [H_I(t), H_I(s), \rho_T(s)] \},$$

onde assumimos que $Tr_E[H_I(t), \rho_T(0)] = 0$. Portanto, temos que:

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i Tr_E \left\{ \left[H_I(t), \int_0^t [H_I(t'), \rho(t')] dt' \right] \right\} . \quad (3.7)$$

Neste ponto, realizamos a primeira aproximação conhecida como *Born approximation* - aproximação de Born. Esta aproximação consiste em assumir que o acoplamento entre o sistema e o reservatório é fraco de tal modo que a influência do sistema no reservatório é pequena. Portanto escrevemos que:

$$\rho_T(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_E$$

e a equação assume a forma:

$$\frac{d\rho_S}{dt} = - \int_0^t ds Tr_E \{ [H_I(t), H_I(s), \rho_S(s) \otimes \rho_E] \} .$$

A segunda aproximação a ser considerada é a aproximação de *Markov*, a qual considera que o estado futuro do sistema só depende do seu estado presente. Esta aproximação consiste em substituir o integrando $\rho_S(s)$ por $\rho_S(t)$:

$$\frac{d\rho_S}{dt} = - \int_0^t ds Tr_E \{ [H_I(t), H_I(s), \rho_S(t) \otimes \rho_E] \}$$

esta equação é conhecida como equação de Redfield, que é local no tempo, mas ainda não é Markoviana visto que a evolução temporal depende explicitamente da preparação do sistema em $t = 0$. Este problema é contornado estudando as escalas de tempo em que o sistema e o reservatório variam. Fisicamente falando, a condição de Markov é justificada. Note que a evolução do sistema pode depender de estados passados, já que está interagindo com o ambiente e causar mudanças neste. Esta mudança no ambiente pode influenciar novamente o sistema S devido à presença do Hamiltoniano de interação. Logo, se considerarmos que o ambiente é muito maior que o sistema, essas mudanças decorrentes da interação não mudarão o estado do ambiente e portanto não influenciarão no estado futuro do sistema. Sendo assim, a análise se baseia em questões do tempo de vida das correlações no ambiente (τ_E) em relação às mudanças no sistema (τ_S), portanto podemos desprezar o efeito passado no seu tempo futuro.

O resultado final para uma dinâmica Markoviana é dado por:

$$\frac{d\rho_S}{dt} = - \int_0^\infty ds \text{Tr}_E \{ [H_I(t), H_I(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_E] \} \quad . \quad (3.8)$$

As aproximações realizadas acima são conhecidas na literatura como *Born-Markov approximation*. Para se obter a equação de Lindblad é necessário realizar mais uma aproximação conhecida como aproximação as ondas girantes (*rotating wave approximation*). Esta aproximação consiste em retirar os termos oscilantes da equação (3.8).

Vamos escrever o Hamiltoniano de interação como

$$H_I = \sum_\alpha A_\alpha \otimes B_\alpha, \quad (3.9)$$

e supondo que o espectro de H_S é discreto, definimos:

$$A_\alpha(\omega) = \sum_{\omega=\epsilon'-\epsilon} |\Psi(\epsilon)\rangle \langle \Psi(\epsilon)| A_\alpha |\Psi(\epsilon')\rangle \langle \Psi(\epsilon')| \quad . \quad (3.10)$$

Note que

$$[H_S, A_\alpha(\omega)] = \epsilon A_\alpha(\omega) - \epsilon' A_\alpha(\omega) = -\omega A_\alpha(\omega) \quad (3.11)$$

$$[H_S, A_\alpha^\dagger(\omega)] = \epsilon' A_\alpha^\dagger(\omega) - \epsilon A_\alpha^\dagger(\omega) = \omega A_\alpha^\dagger(\omega) \quad .$$

Das propriedades acima, a figura de interação para o operador $A_\alpha(\omega)$ assume a seguinte forma:

$$e^{iH_S t} A_\alpha(\omega) e^{-iH_S t} = e^{-i(\epsilon'-\epsilon)t} A_\alpha(\omega) = e^{-\omega t} A_\alpha(\omega) \quad , \quad (3.12)$$

$$e^{iH_S t} A_\alpha^\dagger(\omega) e^{-iH_S t} = e^{i(\epsilon'-\epsilon)t} A_\alpha^\dagger(\omega) = e^{\omega t} A_\alpha^\dagger(\omega) \quad .$$

Observe que

$$\sum_{\omega} A_{\alpha}(\omega) = \sum_{\epsilon, \epsilon'} |\Psi(\epsilon)\rangle \langle \Psi(\epsilon)| A_{\alpha} |\Psi(\epsilon')\rangle \langle \Psi(\epsilon')| = A_{\alpha} \quad . \quad (3.13)$$

Como $A_{\alpha}(\omega) = \sum_{\omega} A_{\alpha}(\omega)$ e $A_I^{\alpha} = e^{-\omega t} A_{\alpha}(\omega)$, escrevemos o Hamiltoniano de interação como

$$H_I = \sum_{\alpha, \omega} e^{-i\omega t} A_{\alpha}(\omega) \otimes B_{\alpha} = \sum_{\alpha, \omega} e^{i\omega t} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \otimes B_{\alpha}^{\dagger} \quad , \quad (3.14)$$

com $B_{\alpha}(t) = e^{iH_E t} B_{\alpha} e^{-iH_E t}$.

Substituindo o Hamiltoniano de interação (3.14) em (3.8), temos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S = \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} T r_E \left[\int_0^{\infty} e^{-i\omega(t-s)} e^{-i\omega' t} A_{\alpha}(\omega) \rho_S A_{\beta}^{\dagger}(\omega') B_{\alpha}(t-s) \rho_E B_{\beta}(t) \right. \\ \left. - A_{\beta}^{\dagger}(\omega') A_{\alpha}(\omega) \rho_S B_{\beta}(t) B_{\alpha}(t-s) \rho_E \right] + h.c. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Definindo as correlações do ambiente como $\Gamma(\omega)$, temos:

$$= \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega - \omega') t} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_{\beta}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega') - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega') A_{\beta}(\omega) \rho_S(t) \right] + h.c. \quad (3.16)$$

onde

$$\Gamma_{\alpha\beta} \equiv \int_0^{\infty} ds e^{i\omega s} \langle B_{\alpha}^{\dagger}(t) B_{\beta}(t-s) \rangle \quad . \quad (3.17)$$

Note que o efeito do ambiente está absorvido no fator Γ , onde os operadores B estão escritos na figura de interação:

$$B(t) = e^{iH_E t} B e^{-iH_E t} \quad . \quad (3.18)$$

Faremos agora a aproximação das ondas girantes (*rotating wave approximation*). Considerando a dependência temporal de (3.16), podemos concluir que termos com $|\omega - \omega'| \gg \alpha^2$, onde α é a intensidade da interação entre o sistema e o ambiente, irão oscilar muito rápido em comparação com o tempo de evolução do sistema, portanto elas não contribuem para sua evolução. Logo, quando fazemos o acoplamento fraco quando $\alpha \rightarrow 0$, contabilizamos somente o termo ressoante $\omega = \omega'$. Temos que

$$\dot{\rho}_S(t) = \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \left(\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_{\beta}(\omega) \rho_S(t), A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \right] + \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega) \left[A_{\beta}(\omega), \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \right] \right) \quad . \quad (3.19)$$

É útil dividir $\Gamma_{\alpha\beta}$ em uma dinâmica Hamiltoniana e não Hamiltoniana:

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\gamma_{\alpha\beta} + iS_{\alpha\beta}(\omega) \quad , \quad (3.20)$$

com

$$S_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{i}{2} \left(\Gamma_{\alpha\beta} + \Gamma_{\alpha\beta}^* \right) \quad (3.21)$$

$$\gamma_{\alpha\beta} = \Gamma_{\alpha\beta} + \Gamma_{\alpha\beta}^*(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} \langle B_{\alpha}(s) B_{\beta}(0) \rangle \quad .$$

Com estas definições, podemos separar a parte Hamiltoniana e a parte não Hamiltoniana da dinâmica e transformar novamente para a forma de Schroedinger. Temos:

$$\dot{\rho}_S(t) = -i [H + H_{LS}, \rho_S(t)] + \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta} \left(A_{\beta}(\omega) \rho_S A_{\alpha}^{\dagger} - \frac{1}{2} \{ A_{\alpha}^{\dagger} A_{\beta}, \rho_S(t) \} \right) \quad (3.22)$$

A dinâmica Hamiltoniana é influenciada pelo termo H_{LS} :

$$H_{LS} = \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega) \quad , \quad (3.23)$$

que é chamado de *Lamb-Shift* e é responsável por renormalizar os níveis de energia devido à interação com o ambiente.

Para tornar a equação para $\dot{\rho}(t)$ na forma de Lindblad, temos que diagonalizar a matriz de coeficientes $\gamma_{\alpha\beta}$:

$$\gamma_{\alpha\beta} = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} \langle B_{\alpha}(s) B_{\beta}(0) \rangle \quad . \quad (3.24)$$

Podemos escrever

$$O\gamma(\omega)O^{\dagger} = \begin{bmatrix} d_1(\omega) & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & d_N(\omega) \end{bmatrix} \quad . \quad (3.25)$$

Logo, obtemos a equação de Lindblad:

$$\dot{\rho}_S(t) = -i [H + H_{LS}, \rho_S(t)] + \sum_{i\omega} \left(A_i(\omega) \rho_S A_i^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \{ A_i^{\dagger} A_i, \rho \} \right) \quad . \quad (3.26)$$

Para sistemas fracamente acoplados ao reservatório, a primeira lei da termodinâmica pode ser obtida com as seguintes expressões [36]:

$$\begin{aligned}\dot{W}(t) &= Tr \left\{ \dot{H}_S \rho_S \right\} \\ \dot{Q}_r(t) &= Tr \left\{ H_S(t) \mathcal{D}_r(\rho_S) \right\}\end{aligned}\tag{3.27}$$

onde $r = L, R$ e $\mathcal{D}_r(\rho_S)$ é dado por:

$$\mathcal{D}_r(\rho_S) = \sum_{\omega} \Gamma_r(\omega) \left(A_r(\omega) \rho A_r^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_r^\dagger(\omega) A_r(\omega), \rho_S \right\} \right) . \tag{3.28}$$

Para Hamiltonianos que não possuem dependência temporal, por (3.27) não temos a realização de trabalho. Sendo assim, a corrente de energia é puramente corrente de calor:

$$\begin{aligned}\dot{E} &= \dot{W} + \sum_r \dot{Q}_r \\ \dot{E} &= \sum_r \dot{Q}_r \equiv \dot{Q}\end{aligned}\tag{3.29}$$

Aplicaremos o estudo da derivação via *weak coupling* (acoplamento fraco) na cadeia XX com objetivo de estudar a existência de retificação térmica.

3.1.1 Retificação térmica - Uma Revisão Bibliográfica

Em fonônica (a contrapartida da eletrônica dedicada à manipulação e controle da corrente de calor) um esforço considerável foi dedicado ao desenvolvimento de dispositivos, i.e., sistemas idealizados para funcionar como análogos eletrônicos, por exemplo, diodos térmicos, transistores térmicos, etc. O fenômeno básico por trás da operação desses dispositivos é a retificação. Os primeiros investimentos nessa direção datam de 1932 [18] (no contexto clássico), com a construção de uma junção de cobre metálico unida a óxido cuproso. Aprimoramentos desses tipos de dispositivos foram feitos utilizando sistemas *graded* (sistemas não homogêneos com uma composição que muda gradualmente no espaço) e interações de longo alcance [48] no contexto clássico. Já no contexto quântico essa é uma direção que começou a ser explorada há pouco tempo [49].

Como mencionado anteriormente, a busca pela construção de dispositivos capazes de exercer controle sobre o fluxo de calor, de forma eficiente, tem sido realizada tanto no contexto clássico quanto, mais recentemente, no contexto quântico. Nas abordagens clássicas, existem trabalhos buscando entender como a anarmonicidade em um potencial de interação pode influenciar o tipo de transporte de energia e o fenômeno de retificação térmica. Na Ref. [50] foi mostrado que cadeias puramente harmônicas, onde cada elemento da cadeia interage com um reservatório estocástico, não apresentam o fenômeno de retificação para qualquer que seja a distribuição de massa do sistema. Este modelo obedece a lei de Fourier e os reservatórios estocásticos que interagem com cada elemento da cadeia “simulam” (representam um papel similar ao de) interações anarmônicas não presentes no hamiltoniano do sistema. Condições suficientes para a existência de retificação térmica em

uma certa classe de modelos clássicos foram estudadas na Ref. [51]. Demonstrou-se que em um sistema cuja distribuição de massa é heterogênea e no qual vale localmente a lei de Fourier (em outras palavras, o fluxo de calor entre dois sítios vizinhos é proporcional à diferença de temperatura) ocorre a retificação térmica.

Já no contexto de sistemas quânticos, o fenômeno de retificação ganhou uma série de ferramentas úteis que podem ser utilizadas para descrever como essa propriedade poderia ser otimizada. Sistemas quânticos abertos regidos pela equação de Lindblad mostraram ter comportamentos termodinâmicos muito interessantes e com promissoras aplicações no controle do seu fluxo de energia [36, 52, 53]. Como exemplo, podemos citar trabalhos envolvendo uma cadeia de Ising com reservatórios térmicos acoplados a suas extremidades: para uma junção com dois spins e um campo longitudinal, foi mostrado que ocorre retificação perfeita no sistema [11]. Nesse caso quando a temperatura do lado A é maior que a do lado B ($T_A > T_B$) o fluxo de calor é diferente de zero e para uma configuração com as temperaturas trocadas ($T_B > T_A$) a corrente se anula [11]. Considerando sistemas maiores que dois spins em uma cadeia de Ising, na Ref. [10], foi mostrado que para se ter um fluxo de calor diferente de zero é necessário acoplar o primeiro e último spin da cadeia, como em uma condição de contorno periódica. Dessa observação notamos que o efeito de interações diversificadas envolvendo muitos corpos pode ser favorável para tarefas de retificação.

O objetivo da Tese neste ponto é estudar as propriedades do transporte de energia para sistemas mais complexos, a cadeia XX , na qual investigaremos com mais detalhes, nas próximas sessões, todas as propriedades do estado estacionário de não equilíbrio.

3.1.2 A Cadeia XX e Retificação Térmica

Nesta parte do capítulo apresentamos o modelo estudado que será evoluído através da equação mestra deduzida anteriormente. A cadeia XX está associada a sistemas antiferromagnéticos unidimensionais, como exemplo [54], e é um modelo com propriedades muito interessantes, pois pode ser tratado de maneira analítica sem a utilização do *ansatz* de Bethe [55], além de possuir outras propriedades interessantes, como exemplo uma transição de fase quântica. O Hamiltoniano desta cadeia é dado por:

$$H_S = \sum_{j=1}^N \frac{h_j}{2} \sigma_j^z + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \alpha_j (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y) \quad (3.30)$$

onde h_j representa a intensidade do campo magnético externo e α_j é a constante de troca entre o spin j e $j + 1$.

Podemos escrever este Hamiltoniano de uma forma mais conveniente se utilizarmos os operadores de “levantamento” e “abaixamento” de spins:

$$\sigma_i^- = \frac{1}{2}(\sigma_i^x - i\sigma_i^y) \quad (3.31)$$

$$\sigma_i^+ = \frac{1}{2}(\sigma_i^x + i\sigma_i^y)$$

Desta forma, o Hamiltoniano assume a seguinte forma:

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N h_j \left(\sigma_j^+ \sigma_j^- - \frac{1}{2} \right) + \sum_{j=1}^{N-1} \alpha_j \left(\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ \right), \quad (3.32)$$

onde neste ponto usamos as propriedades de comutação dos operadores de Pauli $[\sigma_i^+, \sigma_i^-] = \sigma_i^z$. Para estudar as propriedades termodinâmicas deste sistema, necessitamos acoplar o sistema de interesse em reservatórios térmicos, os quais estarão ligados nos extremos da cadeia. O estudo da retificação térmica será realizado em duas etapas: primeiramente vamos usar as transformações de *Jordan-Wigner* para reescrever o Hamiltoniano do sistema em sua forma diagonal e posteriormente usaremos as propriedades geradas das transformações para escrever o dissipador da equação de Lindblad em termos dos operadores de criação e aniquilação de férmions.

3.1.3 As Transformações de *Jordan-Wigner*

O primeiro passo para estudar o problema proposto é usar as transformações de *Jordan-Wigner* [56, 57] para deixar o Hamiltoniano do sistema na forma diagonal. Para isso usaremos os operadores de aniquilação (η_l) e criação (η_l^\dagger) que satisfazem as relações de anticomutação usuais:

$$\{\eta_i, \eta_j^\dagger\} = \delta_{i,j}, \quad \{\eta_i, \eta_j\} = \{\eta_i^\dagger, \eta_j^\dagger\} = 0$$

As transformações que relacionam os operadores de *spin* com os operadores fermiônicos são dados por:

$$\eta_1 = \sigma_1^-, \quad \eta_1^\dagger = \sigma_1^+ \quad , \quad (3.33)$$

$$\eta_l = Q_l \sigma_l^-, \quad \eta_l^\dagger = Q_l \sigma_l^+, \quad Q_l = \left[\prod_{j=1}^{l-1} (-\sigma_j^z) \right], \quad l \geq 2,$$

note que diferentemente dos operadores de Pauli, que comutam para sítios distintos, os operadores fermiônicos ganham uma fase quando permutados entre si, ou seja, $\eta_k^\dagger \eta_l = -\eta_l \eta_k^\dagger$. Vamos demonstrar algumas propriedades satisfeitas por estas transformações.

Para $m > l$, temos

$$\begin{aligned}
 Q_m Q_l &= \left[\prod_{k=1}^{m-1} (-\sigma_k^z) \right] \left[\prod_{k=1}^{l-1} (-\sigma_k^z) \right] \\
 &= \left[\prod_{k=1}^{l-1} (-\sigma_k^z) \right] \left[\prod_{k=l}^{m-1} (-\sigma_k^z) \right] \left[\prod_{k=1}^{l-1} (-\sigma_k^z) \right] \\
 &= Q_l \left[\prod_{k=l}^{m-1} (-\sigma_k^z) \right] Q_l
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

$$Q_m Q_l = Q_l Q_m = \left[\prod_{k=l}^{m-1} (-\sigma_k^z) \right].$$

Mostraremos agora que através das propriedades em (3.33) a relação de anticomutação é satisfeita. Note que

$$\{\eta_l, \eta_m^\dagger\} = \eta_l \eta_m^\dagger + \eta_m^\dagger \eta_l = Q_l \sigma_l^- Q_m \sigma_m^+ + Q_m \sigma_m^+ Q_l \sigma_l^-. \tag{3.35}$$

Para $l = m$, podemos usar (3.34)

$$\eta_l \eta_l^\dagger + \eta_l^\dagger \eta_l = Q_l^2 \sigma_l^- \sigma_l^+ + \sigma_l^+ \sigma_l^- Q_l^2 = 1 \tag{3.36}$$

Para o segundo caso onde $l \neq m$ ($m > l$), escrevemos:

$$\begin{aligned}
 \eta_l \eta_m^\dagger + \eta_m^\dagger \eta_l &= Q_l \sigma_l^- Q_m \sigma_m^+ + Q_m \sigma_m^+ Q_l \sigma_l^- \\
 &= \sigma_l^- \sigma_m^+ Q_l Q_m + Q_m Q_l \sigma_m^+ \sigma_l^- \\
 &= \sigma_l^- \sigma_m^+ \left[\prod_{k=l}^{m-1} (-\sigma_k^z) \right] + \left[\prod_{k=l}^{m-1} (-\sigma_k^z) \right] \sigma_l^- \sigma_m^+ \\
 &= -\sigma_l^- \sigma_l^z \sigma_m^+ \left[\prod_{k=l+1}^{m-1} (-\sigma_k^z) \right] - \left[\prod_{k=l+1}^{m-1} (-\sigma_k^z) \right] \sigma_l^z \sigma_l^- \sigma_m^+ \\
 &= \left[\prod_{k=l+1}^{m-1} (-\sigma_k^z) \right] [\sigma_m^+, \sigma_l^-] \\
 \eta_l \eta_m^\dagger + \eta_m^\dagger \eta_l &= 0
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

Usando as transformações acima, é possível reescrever o Hamiltoniano (3.32) em uma forma diagonal. Note que

$$Q_l Q_{l+1} = -\sigma_l^z \quad (3.38)$$

e que

$$\begin{aligned} \eta_l^\dagger \eta_{l+1} &= Q_l \sigma_l^+ Q_{l+1} \sigma_{l+1}^- \\ &= -\sigma_l^+ \sigma_{l+1}^- Q_l Q_{l+1} \\ &= -\sigma_l^+ \sigma_l^z \sigma_{l+1}^- \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\eta_l^\dagger \eta_{l+1} = \sigma_l^+ \sigma_{l+1}^-.$$

Tomando o complexo conjugado da expressão acima, obtemos o resultado:

$$\eta_{l+1}^\dagger \eta_l = \sigma_l^- \sigma_{l+1}^+ \quad (3.40)$$

Finalizando as mudanças de variáveis, temos que $\eta_l^\dagger \eta_l = \sigma_l^+ \sigma_l^-$. Usando a representação fermiônica, o Hamiltoniano do sistema de interesse é escrito da seguinte maneira:

$$H_S = \sum_{n,m} W_{n,m} \eta_n^\dagger \eta_m, \quad (3.41)$$

onde $W_{j,j} = h_j$ e $W_{j,j+1} = W_{j+1,j} = \alpha_j$

Vemos que a matriz W é simétrica, portanto pode ser diagonalizável:

$$\begin{aligned} \tilde{W} &= S W S^\dagger, \\ W &= S^\dagger \tilde{W} S, \end{aligned} \quad (3.42)$$

onde \tilde{W} é a matriz contendo os autovalores de W .

Substituindo (3.42) no Hamiltoniano, obtemos:

$$\mathcal{H} = \sum_k \tilde{W}_{kk} \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \quad (3.43)$$

onde escrevemos os novos operadores fermiônicos $\tilde{\eta} = S\eta$, definindo a forma diagonal:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_S &= \sum_k \epsilon_k \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \\ \eta_i &= \sum_{l=1}^N S_{i,l}^{-1} \tilde{\eta}_l \quad \eta_i^\dagger = \sum_{l=1}^N S_{i,l}^{-1} \tilde{\eta}_l^\dagger. \end{aligned} \quad (3.44)$$

3.2 Evolução Microscópica e Dissipadores

Obtido o Hamiltoniano na forma diagonal, precisamos descrever as propriedades microscópicas nas quais estamos evoluindo o sistema. O universo de interesse é composto pela cadeia XX acoplada a reservatórios térmicos nas extremidades, ou seja, acoplados através do spin 1 e N a banhos térmicos cujas temperaturas são T_L e T_R . Estes banhos são modelados por um número infinito de graus de liberdade bosônicos dados pelo Hamiltoniano:

$$H_E^i = \sum_k \Omega_k a_{i,k}^\dagger a_{i,k} \quad , \quad (3.45)$$

onde $a_{i,k}$ são os operadores bosônicos e Ω_k são as frequências correspondentes, assumindo valores entre $[0, \infty)$.

A interação entre o sistema e o banho será dada por:

$$\begin{aligned} H_I^L &= \sigma_1^x \sum_k g_k (a_{L,k}^\dagger + a_{L,k}) \\ H_I^R &= \sigma_N^x \sum_k g_k (a_{R,k}^\dagger + a_{R,k}) \quad . \end{aligned} \quad (3.46)$$

A equação na forma de Lindblad, demonstrada no começo do capítulo, nos fornece os seguintes dissipadores:

$$\mathcal{D}(\rho) = \sum_\omega \Gamma(\omega) \left(A(\omega) \rho A^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{ A^\dagger(\omega) A(\omega), \rho \} \right) \quad . \quad (3.47)$$

O processo agora é reescrever os dissipadores (3.47) em termos dos operadores fermiônicos (3.44). Pelo Hamiltoniano de interação em (3.46), o operador do sistema que causa pulos dos spins na cadeia é σ_x e por isso temos que reescrevê-lo em termos dos operadores fermiônicos. Note que:

$$\eta_1 = \sigma_1^- \quad \eta_1^\dagger = \sigma_1^+ \quad (3.48)$$

$$\sigma^\pm = \frac{\sigma_x \pm \sigma_y}{2},$$

então,

$$\sigma_1^x = \sigma_1^+ + \sigma_1^- = \eta_1 + \eta_1^\dagger. \quad (3.49)$$

Fazendo a transformação em termos dos novos operadores fermiônicos $\tilde{\eta}$ e $\tilde{\eta}^\dagger$, encontramos:

$$\begin{aligned}\tilde{\eta} &= S\eta & \eta &= S^{-1}\tilde{\eta} \quad , \\ \tilde{\eta}^\dagger &= \eta^\dagger S^\dagger & \eta^\dagger &= \tilde{\eta}^\dagger S\end{aligned}\quad . \tag{3.50}$$

Portanto, podemos escrever

$$\sigma_1^x = \eta_1 + \eta_1^\dagger \quad , \tag{3.51}$$

$$\sigma_1^x = \sum_k S_{1,k}^{-1} + \sum_k S_{k,1} \tilde{\eta}_k^\dagger,$$

mas sabemos que $S^{-1} = S^\dagger$. Por fim, chegamos em:

$$\boxed{\sigma_1^x = \sum_k S_{1,k}^{-1} (\tilde{\eta}_k + \tilde{\eta}_k^\dagger)} . \tag{3.52}$$

Sabemos que $A(\omega)$ é auto-operador do Hamiltoniano com frequência $-\omega$, mostraremos agora que, por(3.44), $\tilde{\eta}$ e $\tilde{\eta}^\dagger$ também serão auto-operadores de H .

Mostramos no começo da seção que o Hamiltoniano do sistema pode ser escrito como $\mathcal{H} = \sum_k \epsilon_k \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k$. Calculando o comutador entre \mathcal{H} e $\tilde{\eta}_j$, temos:

$$[\mathcal{H}, \tilde{\eta}_j] = \mathcal{H}\tilde{\eta}_j - \tilde{\eta}_j\mathcal{H} \tag{3.53}$$

$$\mathcal{H}\tilde{\eta}_j = \sum_k \epsilon_k \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_j,$$

onde, usando as relações de anticomutação de férmions, obtemos:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}\tilde{\eta}_j &= - \sum_k \epsilon_k \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_j \tilde{\eta}_k \\ &= - \sum_k \epsilon_k (\delta_{k,j} - \tilde{\eta}_j \tilde{\eta}_k^\dagger) \tilde{\eta}_k \\ &= - \sum_k \epsilon_k \delta_{k,j} \tilde{\eta}_k + \sum_k \epsilon_k \tilde{\eta}_j \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k\end{aligned} \tag{3.54}$$

$$\mathcal{H}\tilde{\eta}_j = -\epsilon_j \tilde{\eta}_j + \tilde{\eta}_j \mathcal{H}$$

$$[\mathcal{H}, \tilde{\eta}_j] = -\epsilon_j \tilde{\eta}_j \quad .$$

Vemos que o operador η_j é auto-operador de \mathcal{H} com frequência ϵ_j . O raciocínio análogo vale para o operador adjunto η_j^\dagger , cuja frequência será $-\epsilon_j$.

Temos que reescrever o operador $A(\omega)$ em termos dos operadores fermiônicos, levando em consideração o fato de que também são auto operadores do Hamiltoniano. Temos:

$$A(\omega) = \sum_k S_{1,k}^{-1} \left(\tilde{\eta}_k \delta_{\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger \delta_{-\epsilon_k, \omega} \right) \quad (3.55)$$

como $A^\dagger(\omega) = A(-\omega)$

$$A^\dagger(\omega) = \sum_k S_{1,k}^{-1} \left(\tilde{\eta}_k \delta_{-\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger \delta_{\epsilon_k, \omega} \right). \quad (3.56)$$

Substituindo este resultado na expressão para os dissipadores:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_L(\rho) = \sum_\omega \Gamma(\omega) \sum_k \left[\left[(S_{1,k}^{-1})^2 \left(\tilde{\eta}_k \delta_{\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger \delta_{-\epsilon_k, \omega} \right) \rho \left(\tilde{\eta}_k \delta_{-\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger \delta_{\epsilon_k, \omega} \right) \right] \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \left\{ (S_{1,k}^{-1})^2 \left(\tilde{\eta}_k \delta_{-\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger \delta_{\epsilon_k, \omega} \right) \left(\tilde{\eta}_k \delta_{-\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger \delta_{\epsilon_k, \omega} \right), \rho \right\} \right]. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Simplificando a expressão acima, encontramos:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\rho) = \sum_k \left\{ \Gamma(\epsilon_k) \left[(S_{1,k}^{-1})^2 \left(\tilde{\eta}_k \rho \tilde{\eta}_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \right\} \right) \right] \right. \\ \left. + \Gamma(-\epsilon_k) \left[(S_{1,k}^{-1})^2 \left(\tilde{\eta}_k^\dagger \rho \tilde{\eta}_k - \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \right\} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Continuando o procedimento, temos que substituir o valor de $\Gamma(\omega)$ que representa a transformada de Fourier das correlações emergentes da evolução microscópica. Como deduzido no começo do capítulo, temos que

$$\Gamma(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle B(t) B(0) \rangle dt \quad (3.59)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \text{Tr} \left\{ e^{iH_B t} B e^{-iH_B t} B e^{-\beta H_B} / Z \right\}$$

onde $Z = \text{Tr} \{ e^{-\beta H_B} \}$ e $H_B = \sum_l \Omega_l a_l^\dagger a_l$.

- *Demonstração do Cálculo de $\Gamma(\omega)$*

Para realizar este cálculo, utilizaremos as propriedades dos operadores de criação e aniquilação de modos bosônicos. Temos que

$$\begin{aligned} a_l | \dots n_l \dots \rangle &= \sqrt{n_l} | \dots n_l - 1 \dots \rangle \\ a_l^\dagger | \dots n_l \dots \rangle &= \sqrt{n_l + 1} | \dots n_l + 1 \dots \rangle \end{aligned} \quad (3.60)$$

Então podemos escrever:

$$\begin{aligned} & Tr \left\{ e^{\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} \left(\sum_l g_l (a_l^\dagger + a_l) \right) e^{-\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} \left(\sum_{l'} g_{l'} (a_{l'}^\dagger + a_{l'}) \right) e^{-\beta H_B / Z} \right\} \quad (3.61) \\ &= \sum_{|\dots\rangle} \langle \dots n_i \dots | e^{\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} \left(\sum_l g_l (a_l^\dagger + a_l) \right) e^{-\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} \left(\sum_{l'} g_{l'} (a_{l'}^\dagger + a_{l'}) \right) e^{-\beta H_B / Z} | \dots n_i \dots \rangle \end{aligned}$$

note que no traço calculado acima, só restam os valores dados por $g_l^2 a_l^\dagger a_l$ e $g_l^2 a_l a_l^\dagger$, por isso separaremos a resolução em dois termos. Para o termo $g_l^2 a_l a_l^\dagger$ temos:

$$\begin{aligned} &= \sum_{|\dots\rangle} \langle \dots n_i \dots | e^{\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} (g_l a_l) e^{-\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} (g_l a_l^\dagger) e^{-\beta H_B / Z} | \dots n_i \dots \rangle \\ &= \sum_{|\dots\rangle} \langle \dots n_i \dots | e^{\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} (g_l a_l) e^{-\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} (g_l \sqrt{n_l + 1}) e^{-\beta H_B / Z} | \dots n_i + 1 \dots \rangle \\ &= \sum_{|\dots\rangle} \langle \dots n_i \dots | e^{\sum_{i \neq l} \Omega_i a_i^\dagger a_i t} e^{i \Omega_l n_l t} a_l (g_l \sqrt{n_l + 1}) e^{-\sum_{i \neq l} \Omega_i a_i^\dagger a_i t} e^{-i \Omega_l (n_l + 1) t} (g_l \sqrt{n_l + 1}) e^{-\beta H_B / Z} | \dots n_i \dots \rangle \\ &= \sum_{|\dots\rangle} \langle \dots n_i \dots | g_l^2 (n_l + 1) e^{-i \Omega_l t} e^{-\beta H_B / Z} | \dots n_i \dots \rangle \\ &= \sum_l g_l^2 (\tilde{n}_l + 1) e^{-\Omega_l t} \end{aligned} \quad (3.62)$$

Para o segundo termo, dado por $g_l^2 a_l^\dagger a_l$, encontramos:

$$\begin{aligned} &= \sum_{|\dots\rangle} \langle \dots n_i \dots | e^{\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} (g_l a_l^\dagger) e^{-\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} (g_l a_l) e^{-\beta H_B / Z} | \dots n_i \dots \rangle \\ &= \sum_{|\dots\rangle} \langle \dots n_i \dots | e^{\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} (g_l a_l^\dagger) e^{-\sum_i \Omega_i a_i^\dagger a_i t} (g_l \sqrt{n_l}) e^{-\beta H_B / Z} | \dots n_i - 1 \dots \rangle \end{aligned} \quad (3.63)$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{|\dots\rangle} \langle \dots n_i \dots | e^{i\Omega_l n_l t} e^{\sum_{i \neq l} \Omega_i a_i^\dagger a_i t} (g_l \sqrt{n_l}) e^{-i\Omega_l (n_l - 1)t} e^{-\sum_{i \neq l} \Omega_i a_i^\dagger a_i t} (g_l \sqrt{n_l}) e^{-\beta H_B} / Z | \dots n_i \dots \rangle \\
 &= \sum_{|\dots\rangle} \langle \dots n_i \dots | g_l^2(n_l) e^{i\Omega_l t} e^{-\beta H_B} / Z | \dots n_i \dots \rangle \\
 &= \sum_l g_l^2(\tilde{n}_l + 1) e^{\omega_l t}
 \end{aligned}$$

onde usamos que $\langle \dots n_l \dots | n_l | \dots n_l \dots \rangle = \tilde{n}_l(\Omega_l)$. Realizando a integração de $\int_{-\infty}^{\infty} \langle B(t)B(0) \rangle e^{i\Omega t}$, obtemos

$$\Gamma(\omega) = 2\pi \sum_l g_l^2 \{ (\tilde{n}_l(\Omega_l) + 1) \delta_{\omega - \Omega_l} + \tilde{n}_l(\Omega_l) \delta_{\omega + \Omega_l} \} \quad (3.64)$$

$$\Gamma(\omega) \approx \int_0^\infty d\Omega G(\Omega) \{ (\tilde{n}(\Omega) + 1) \delta_{\omega - \Omega} + \tilde{n}(\Omega) \delta_{\omega + \Omega} \}.$$

Note que a soma foi transformada em uma integral assumindo que as frequências do banho (Ω_l) assumem valores contínuos. A função $G(\Omega)$ corresponde a $2\pi g_l^2$ multiplicada por fatores que surgem da transformação da soma para uma integral, os quais não dependem da temperatura. Para simplificação, assumiremos que $G(\Omega) = \gamma$, com γ constante. Portanto, temos que

$$\Gamma(\omega) = \begin{cases} \gamma[1 + n(\omega)], & \text{se } \omega > 0 \\ \gamma n(-\omega), & \text{se } \omega < 0 \end{cases} \quad (3.65)$$

Substituindo a definição de $\Gamma(\omega)$, encontramos:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}_L(\rho) &= \sum_{\epsilon_k > 0} \gamma (S_{1,k}^{-1})^2 \left\{ [1 + n(\epsilon_k)] \left[\tilde{\eta}_k \rho \tilde{\eta}_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \} \right] \right. \\
 &\quad \left. + n(\epsilon_k) \left[\tilde{\eta}_k^\dagger \rho \tilde{\eta}_k - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \} \right] \right\} + \\
 &\quad \sum_{\epsilon_k < 0} \gamma (S_{1,k}^{-1})^2 \left\{ n(-\epsilon_k) \left[\tilde{\eta}_k \rho \tilde{\eta}_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \} \right] \right. \\
 &\quad \left. + [1 + n(-\epsilon_k)] \left[\tilde{\eta}_k^\dagger \rho \tilde{\eta}_k - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \} \right] \right\} \quad (3.66)
 \end{aligned}$$

A separação do espectro de energia em positivo e negativo não é a forma mais conveniente de se analisar o dissipador. Introduziremos agora a ocupação de Fermi-Dirac e uma função auxiliar, dependente da temperatura e dos autovalores, de tal modo que o dissipador assuma uma forma simplificada.

A distribuição de Fermi-Dirac será a chave para desenvolvermos os procedimentos futuros e é uma estatística que descreve o comportamento dos férmions, os quais obedecem o princípio de exclusão de Pauli. Matematicamente ela é descrita por

$$f_{L(R),k} = \frac{1}{e^{\beta_{L(R)}\epsilon_k} + 1},$$

onde $\beta_{L(R)}$ é a função inversa da temperatura. A função auxiliar que vamos introduzir é dada por:

$$\chi_{L(R),k} = 1 + 2n_{L(R)}(|\epsilon_k|) = \coth\left(\frac{|\epsilon_k|}{2T_{L(R)}}\right). \quad (3.67)$$

Com a distribuição de Fermi-Dirac e a nova função auxiliar, podemos escrever:

- Cálculo de $\chi_{L(R),k}(1 - f_{L(R),k})$

$$\begin{aligned} \chi_{L(R),k}(1 - f_{L(R),k}) &= \left(\frac{e^{\beta_{L(R)}} + 1}{e^{\beta_{L(R)}} - 1}\right) \left(\frac{e^{\beta_{L(R)}}}{e^{\beta_{L(R)}} + 1}\right) \\ &= \frac{e^{\beta_{L(R)}}}{e^{\beta_{L(R)}} - 1} = 1 + \tilde{n}(\epsilon_k) \end{aligned}$$

- Cálculo de $\chi_{L(R),k}f_{L(R),k}$

$$\begin{aligned} \chi_{L(R),k}f_{L(R),k} &= \left(\frac{e^{\beta_{L(R)}} + 1}{e^{\beta_{L(R)}} - 1}\right) \left(\frac{1}{e^{\beta_{L(R)}} + 1}\right) \\ &= \frac{1}{e^{\beta_{L(R)}} - 1} = \tilde{n}(\epsilon_k). \end{aligned}$$

Com os resultados apresentados acima, vemos que é possível reescrever o dissipador $\mathcal{D}_L(\rho)$ na seguinte forma simplificada:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_L(\rho) &= \sum_k \gamma \left(S_{1,k}^{-1}\right)^2 \chi_{L,k} \left\{ (1 - f_{L,k}) \left[\tilde{\eta}_k \rho \tilde{\eta}_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \right\} \right] \right. \\ &\quad \left. + f_{L,k} \left[\tilde{\eta}_k^\dagger \rho \tilde{\eta}_k - \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \right\} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Prosseguiremos o resultado para o dissipador do lado direito, o qual representa o reservatório atuando no sítio N . Neste sítio, temos o operador σ_N^x , logo

$$\eta_N = Q_N \sigma_N^- \quad \eta_N^\dagger = Q_N \sigma_N^+ . \quad (3.69)$$

Avaliando σ_N^x em termos dos operadores fermiônicos, encontramos

$$\eta_N + \eta_N^\dagger = Q_N (\sigma_N^- + \sigma_N^+)$$

$$\eta_N + \eta_N^\dagger = Q_N (\sigma_N^x)$$

$$\sigma_N^x = Q_N (\eta_N + \eta_N^\dagger) \quad ,$$

onde usamos o fato que $Q_N^2 = 1$. Nesta parte dos resultados, é interessante definir o número total de férmions no sistema, dado por

$$\mathcal{N} = \sum_{i=1}^N \sigma_i^+ \sigma_i^- = \sum_{i=1}^N \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_i .$$

Reescrevendo o operador σ_N^x , temos

$$\sigma_N^x = Q_N (-\sigma_N^z) (-\sigma_N^z) (\eta_N^\dagger + \eta_N) . \quad (3.70)$$

É fácil notar que $\prod_{j=1}^{N-1} (-\sigma_j^z) = \prod_{j=1}^{N-1} e^{i\pi \sigma_j^+ \sigma_j^-}$, logo

$$\sigma_N^x = e^{i\pi \mathcal{N}} e^{-i\pi \eta_N^\dagger \eta_N} (\eta_N^\dagger + \eta_N) . \quad (3.71)$$

Vamos fazer uma análise do fator $e^{-i\pi \eta_N^\dagger \eta_N}$ presente na expressão acima. Observe que se o último sítio conter um férmion temos

$$e^{-i\pi \eta_N^\dagger \eta_N} (\eta_N^\dagger + \eta_N) |0\rangle = -|1\rangle$$

$$e^{-i\pi \eta_N^\dagger \eta_N} (\eta_N^\dagger + \eta_N) |1\rangle = |0\rangle ,$$

logo podemos escrever que

$$\boxed{\sigma_N^x = e^{i\pi \mathcal{N}} (\eta_N - \eta_N^\dagger)} . \quad (3.72)$$

Temos que escrever σ_N^x em termos dos novos operadores fermiônicos definidos em (3.44). Note que

$$\eta = S^{-1}\tilde{\eta} \quad \eta_N = \sum_{j=1}^N S_{N,j}^{-1}\tilde{\eta}_j \quad (3.73)$$

$$\eta^\dagger = \tilde{\eta}^\dagger S \quad \eta_N^\dagger = \sum_{j=1}^N \tilde{\eta}_j^\dagger S_{j,N},$$

mas como $S^{-1} = S^T$ temos que $S_{j,N} = S_{N,j}^{-1}$. Portanto

$$\sigma_N^x = \sum_{k=1}^N S_{N,k}^{-1} e^{i\pi N} (\tilde{\eta}_k - \tilde{\eta}_k^\dagger).$$

Note que, usando as propriedades da transformação de Jordan-Wigner, o operador $e^{i\pi N}$ e $\tilde{\eta}_k^\dagger$ possuem anticomutador nulo, ou seja, $\{e^{i\pi N}, \tilde{\eta}_k^\dagger\} = 0$. Logo podemos escrever

$$\sigma_N^x = \sum_{k=1}^N S_{N,k}^{-1} (e^{i\pi N} \tilde{\eta}_k + \tilde{\eta}_k^\dagger e^{i\pi N}). \quad (3.74)$$

Com a diagonalização do Hamiltoniano e as relações de anticomutação de férmions, é fácil ver que $[\mathcal{H}, \mathcal{N}] = 0$, portanto $S_{N,k}^{-1} e^{i\pi N} \tilde{\eta}_k$ é um auto-operador do Hamiltoniano com frequência $-\epsilon_k$ ($\omega = \epsilon_k$) e que $S_{N,k}^{-1} e^{i\pi N} \tilde{\eta}_k^\dagger$ é auto-operador com frequência ϵ_k ($\omega = -\epsilon_k$). Sendo assim, o auto-operador envolvendo σ_N^x é escrito como:

$$A(\omega) = \sum_k S_{N,k}^{-1} (e^{i\pi N} \tilde{\eta}_k \delta_{\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger e^{i\pi N} \delta_{-\epsilon_k, \omega}), \quad (3.75)$$

e como $A^\dagger(\omega) = A(-\omega)$, temos

$$A^\dagger(\omega) = \sum_k S_{N,k}^{-1} (e^{i\pi N} \tilde{\eta}_k \delta_{-\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger e^{i\pi N} \delta_{\epsilon_k, \omega}). \quad (3.76)$$

Reescrevendo o dissipador acoplado ao último spin obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_R(\rho) = & \sum_{\omega} \Gamma(\omega) \sum_k \left[[(S_{1,k}^{-1})^2 (e^{i\pi N} \tilde{\eta}_k \delta_{\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger e^{i\pi N} \delta_{-\epsilon_k, \omega}) \rho (e^{i\pi N} \tilde{\eta}_k \delta_{-\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger e^{i\pi N} \delta_{\epsilon_k, \omega})] \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \left\{ (S_{1,k}^{-1})^2 (e^{i\pi N} \tilde{\eta}_k \delta_{-\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger e^{i\pi N} \delta_{\epsilon_k, \omega}) (e^{i\pi N} \tilde{\eta}_k \delta_{-\epsilon_k, \omega} + \tilde{\eta}_k^\dagger e^{i\pi N} \delta_{\epsilon_k, \omega}), \rho \right\} \right] \end{aligned}$$

Simplificando a expressão acima, encontramos:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_R(\rho) = \sum_k \{ \Gamma(\epsilon_k) \left[(S_{1,k}^{-1})^2 \left(e^{i\pi\mathcal{N}} \tilde{\eta}_k \rho \tilde{\eta}_k^\dagger e^{i\pi\mathcal{N}} - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \} \right) \right] \\ + \Gamma(-\epsilon_k) \left[(S_{1,k}^{-1})^2 \left(e^{i\pi\mathcal{N}} \tilde{\eta}_k^\dagger \rho \tilde{\eta}_k e^{i\pi\mathcal{N}} - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \} \right) \right] \} \end{aligned} \quad (3.77)$$

onde usamos o fato que $e^{i2\pi\mathcal{N}} = 1$, $\{e^{i\pi\mathcal{N}}, \tilde{\eta}_k^\dagger\} = 0$ e $\{e^{i\pi\mathcal{N}}, \tilde{\eta}_k\} = 0$. De maneira análoga ao realizado para $\mathcal{D}_L(\rho)$ em (3.58) e (3.68), obtemos o dissipador para o *spin* acoplado ao reservatório do lado direito:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_R(\rho) = \sum_k \gamma \left(S_{N,k}^{-1} \right)^2 \chi_{R,k} \left\{ (1 - f_{R,k}) \left[\tilde{\eta}_k e^{i\pi\mathcal{N}} \rho e^{i\pi\mathcal{N}} \tilde{\eta}_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \} \right] \right. \\ \left. + f_{R,k} \left[\tilde{\eta}_k^\dagger e^{i\pi\mathcal{N}} \rho e^{i\pi\mathcal{N}} \tilde{\eta}_k - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.78)$$

Para simplificar a notação, vamos definir:

$$g_{L,k} = \left(S_{1,k}^{-1} \right)^2 \quad g_{R,k} = \left(S_{N,k}^{-1} \right)^2. \quad (3.79)$$

Com as expressões para os dissipadores em mãos, temos a expressão final para a equação de Lindblad, a qual nos fornece a evolução temporal da matriz densidade do sistema. Com esta expressão, seguiremos a investigação da existência de retificação térmica na cadeia XX .

3.2.1 Propriedades do Estado Estacionário de não equilíbrio

Com toda a formulação desenvolvida em termos dos operadores fermiônicos, podemos estudar o comportamento de observáveis como $\langle \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle &= \frac{d}{dt} Tr \left\{ \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \rho \right\} \\ &= Tr \left\{ \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \frac{d}{dt} \rho \right\}. \end{aligned}$$

Vamos escrever alguns resultados importantes envolvendo os operadores fermiônicos:

$$\bullet \quad \left[\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j, \tilde{\eta}_n \right] = -\delta_{i,n} \tilde{\eta}_j$$

Demonstração: Usando as relações de anticomutação de férmions, $\{ \tilde{\eta}_a^\dagger, \tilde{\eta}_b \} = \delta_{a,b}$ e $\{ \tilde{\eta}_a, \tilde{\eta}_b \} = 0$, temos:

$$\begin{aligned}
 [\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j, \tilde{\eta}_n] &= \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \tilde{\eta}_n - \tilde{\eta}_n \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \\
 &= \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \tilde{\eta}_n - \tilde{\eta}_j \delta_{i,n} + \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_n \tilde{\eta}_j
 \end{aligned} \tag{3.80}$$

$$[\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j, \tilde{\eta}_n] = -\delta_{i,n} \tilde{\eta}_j.$$

Similarmente aplicado ao operador $\tilde{\eta}_n^\dagger$ encontramos:

$$[\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j, \tilde{\eta}_n^\dagger] = \delta_{j,n} \tilde{\eta}_i^\dagger. \tag{3.81}$$

Para auxiliar o cálculo dos valores esperados dos operadores fermiônicos, introduziremos agora o dissipador adjunto. Note que através da equação de Lindblad, podemos calcular o valor esperado de qualquer operador \mathcal{O} :

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle \mathcal{O} \rangle &= Tr \left\{ \mathcal{O} \frac{d\rho}{dt} \right\} \\
 &= -i Tr \{ \mathcal{O} [\mathcal{H}, \rho] \} + Tr \{ \mathcal{O} \mathcal{D}(\rho) \}
 \end{aligned}$$

Vamos trabalhar com o segundo termo apresentado acima:

$$Tr \{ \mathcal{O} \mathcal{D}(\rho) \} = Tr \left\{ \mathcal{O} \left(L\rho L^\dagger - \frac{1}{2} \{ L^\dagger L, \rho \} \right) \right\}$$

usando a propriedade cíclica do traço, podemos escrever

$$Tr \{ \mathcal{O} \mathcal{D}(\rho) \} = Tr \{ L^\dagger \mathcal{O} L \rho \} - \frac{1}{2} Tr \left[\{ L^\dagger L, \mathcal{O} \} \rho \right]$$

$$Tr \{ \mathcal{O} \mathcal{D}(\rho) \} = \left\langle L^\dagger \mathcal{O} L - \frac{1}{2} \{ L^\dagger L, \mathcal{O} \} \right\rangle.$$

Esta expressão possui o mesmo formato do dissipador que trabalhamos. Note que podemos escrever:

$$\begin{aligned}
 \tilde{D}[L](\mathcal{O}) &= L^\dagger \mathcal{O} L - \frac{1}{2} L^\dagger L \mathcal{O} - \frac{1}{2} \mathcal{O} L^\dagger L \\
 \tilde{D}[L](\mathcal{O}) &= \frac{1}{2} L^\dagger [\mathcal{O}, L] + \frac{1}{2} [L^\dagger, \mathcal{O}] L.
 \end{aligned} \tag{3.82}$$

Estamos interessados nas ocupações, ou seja, $\mathcal{O} = \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j$, portanto, de acordo com o dissipador em (3.82) temos:

$$\begin{aligned}
 \tilde{D} [\tilde{\eta}_k] (\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j) &= \frac{1}{2} \tilde{\eta}_k^\dagger [\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j, \tilde{\eta}_k] + \frac{1}{2} [\tilde{\eta}_k^\dagger, \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j] \tilde{\eta}_k \\
 &= -\frac{1}{2} (\delta_{i,k} + \delta_{j,k}) \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j
 \end{aligned} \tag{3.83}$$

para o operador $\tilde{\eta}_k^\dagger$

$$\begin{aligned}
 \tilde{D} [\tilde{\eta}_k] (\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j) &= \frac{1}{2} \tilde{\eta}_k [\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j, \tilde{\eta}_k^\dagger] + \frac{1}{2} [\tilde{\eta}_k, \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j] \tilde{\eta}_k^\dagger \\
 &= \frac{1}{2} (\delta_{i,k} + \delta_{j,k}) \tilde{\eta}_j \tilde{\eta}_i^\dagger.
 \end{aligned} \tag{3.84}$$

Note que o dissipador em (3.68) pode ser escrito como:

$$\mathcal{D}_L(\rho) = \sum_k D_k^L \tag{3.85}$$

com D_k^L dado por

$$D_k^L = \mathcal{A}_k^L \left[\tilde{\eta}_k \rho \tilde{\eta}_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \} \right] + \mathcal{B}_k^L \left[\tilde{\eta}_k^\dagger \rho \tilde{\eta}_k - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \} \right]$$

onde $\mathcal{A}_k^L = \gamma g_{L,k} \chi_{L,k} (1 - f_{L,k})$ e $\mathcal{B}_k^L = \gamma g_{L,k} \chi_{L,k} f_{L,k}$. Simplificamos a notação fazendo que $g_{L,k} = (S_{1,k}^{-1})^2$.

Juntando (3.83), (3.84) e (3.85) encontramos

$$\begin{aligned}
 Tr \{ \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j D_k^L \} &= -\frac{\mathcal{A}_k^L}{2} \delta_{i,k} \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_j - \frac{\mathcal{A}_k^L}{2} \delta_{j,k} \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_k \\
 &\quad - \frac{\mathcal{B}_k^L}{2} \delta_{i,k} \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_j - \frac{\mathcal{B}_k^L}{2} \delta_{j,k} \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_k \\
 &\quad + \frac{\mathcal{B}_k^L}{2} (\delta_{i,k} + \delta_{j,k}) \delta_{i,j} \quad .
 \end{aligned} \tag{3.86}$$

Sendo assim, encontramos a primeira contribuição referente ao dissipador acoplado ao lado esquerdo da cadeia ($i \neq j$)

$$Tr \{ \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \mathcal{D}_L(\rho) \} = -\frac{\gamma}{2} (g_{L,i} \chi_{L,i} + g_{L,j} \chi_{L,j}) \langle \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle \quad . \tag{3.87}$$

Precisamos fazer o mesmo procedimento para o dissipador acoplado ao lado direito. Note que ele apresenta um fator exponencial, $e^{i\pi\mathcal{N}}$, junto aos operadores fermiônicos:

$$\mathcal{D}_R(\rho) = \sum_k D_k^R$$

com D_k^R dado por

$$D_k^R = \mathcal{A}_k^R \left[\tilde{\eta}_k e^{i\pi\mathcal{N}} \rho e^{i\pi\mathcal{N}} \tilde{\eta}_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \right\} \right] + \mathcal{B}_k^R \left[\tilde{\eta}_k^\dagger e^{i\pi\mathcal{N}} \rho e^{i\pi\mathcal{N}} \tilde{\eta}_k - \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \right\} \right]$$

Mostraremos agora que $\{e^{i\pi\mathcal{N}}, \eta_\alpha\} = 0$.

Demonstração. Pela transformação de Jordan-Wigner, temos que

$$\begin{aligned} \eta_1 &= \sigma_1^-, & \eta_1^\dagger &= \sigma_1^+ \\ \eta_l &= Q_l \sigma_l^-, & \eta_l^\dagger &= Q_l \sigma_l^+, & Q_l &= \left[\prod_{j=1}^{l-1} (-\sigma_j^z) \right], & l &\geq 2, \end{aligned}$$

Podemos escrever que

$$e^{i\pi\mathcal{N}} = e^{i\pi \sum_{j=1}^N \sigma_j^+ \sigma_j^-} = \prod_{j=1}^N e^{i\pi \sigma_j^+ \sigma_j^-} = \prod_{j=1}^N (-\sigma_j^z) = Q_N (-\sigma_N^z)$$

Temos:

$$e^{i\pi\mathcal{N}} \eta_\alpha = Q_N (-\sigma_N^z) Q_\alpha \sigma_\alpha^-$$

note que os operadores de spin comutam para sítios distintos. Suponha que $\alpha < N$:

$$\begin{aligned} e^{i\pi\mathcal{N}} \eta_\alpha &= Q_N Q_\alpha (-\sigma_N^z) \sigma_\alpha^- \\ &= Q_\alpha Q_N (\sigma_\alpha^-) (-\sigma_N^z) \end{aligned}$$

note que

$$Q_N \sigma_\alpha^- = \prod_{j=1, j \neq \alpha}^{N-1} (-\sigma_j^z) (-\sigma_\alpha^z) (\sigma_\alpha^-)$$

avaliando o produto de $\sigma_\alpha^z \sigma_\alpha^-$

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

$$\sigma_\alpha^z \sigma_\alpha^- = \sigma_\alpha^- \sigma_\alpha^z$$

onde foi usado que $\sigma_x \sigma_z = -\sigma_z^x$. Concluimos o resultado

$$e^{i\pi N} \eta_\alpha = -Q_\alpha \sigma_\alpha^- Q_N(-\sigma_N^z) = -\eta_\alpha e^{i\pi N}.$$

O mesmo raciocínio é válido para $\eta_\alpha^\dagger = Q_\alpha \sigma_\alpha^+$ e também para $\tilde{\eta} = S\eta$, pois os novos operadores fermiônicos são somas dos antigos.

Para $\alpha = N$, temos:

$$e^{i\pi N} \eta_N = Q_N(-\sigma_N^z) Q_N(\sigma_N^-)$$

$$e^{i\pi N} \eta_N = -Q_N \sigma_N^- Q_N(-\sigma_N^z) = -\eta_N e^{i\pi N},$$

logo concluimos a prova:

$$\boxed{\{e^{i\pi N}, \eta_\alpha\} = 0}$$

□

Com esta demonstração, podemos prosseguir com o cálculo do dissipador adjunto para o reservatório acoplado ao lado direito. Note que

$$Tr \{ \mathcal{O} \mathcal{D}_R(\rho) \} = Tr \left\{ \mathcal{O} \left(L e^{i\pi N} \rho e^{i\pi N} L^\dagger - \frac{1}{2} \{ L^\dagger L, \rho \} \right) \right\}$$

usando a propriedade cíclica do traço, podemos escrever:

$$Tr \{ \mathcal{O} \mathcal{D}_R(\rho) \} = Tr \left\{ e^{i\pi N} L^\dagger \mathcal{O} L e^{i\pi N} \rho \right\} - \frac{1}{2} Tr \left[\{ L^\dagger L, \mathcal{O} \} \rho \right]$$

$$Tr \{ \mathcal{O} \mathcal{D}_R(\rho) \} = \left\langle L^\dagger \mathcal{O} L - \frac{1}{2} \{ L^\dagger L, \mathcal{O} \} \right\rangle,$$

onde usamos que

$$\left\langle e^{i\pi N} L^\dagger \mathcal{O} L e^{i\pi N} \right\rangle = \left\langle L^\dagger \mathcal{O} L \right\rangle.$$

Com este resultado, através do procedimento realizado para o lado esquerdo, podemos concluir, para $i \neq j$ que

$$Tr \left\{ \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \mathcal{D}_R(\rho) \right\} = -\frac{\gamma}{2} (g_{R,i} \chi_{R,i} + g_{R,j} \chi_{R,j}) \left\langle \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \right\rangle. \quad (3.88)$$

Por fim, podemos avaliar agora o comutador do Hamiltoniano com $\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j$:

$$[\mathcal{H}, \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j] = [\mathcal{H}, \tilde{\eta}_i^\dagger] \tilde{\eta}_j + \tilde{\eta}_i^\dagger [\mathcal{H}, \tilde{\eta}_j] \quad (3.89)$$

com $\mathcal{H} = \sum_k \epsilon_k \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k$. Por (3.54), sabemos que $\tilde{\eta}_j$ é auto operador do Hamiltoniano com frequência ϵ_j e que $\tilde{\eta}_i^\dagger$ é auto operador com frequência $-\epsilon_i$, logo

$$[\mathcal{H}, \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j] = (\epsilon_i - \epsilon_j) \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j. \quad (3.90)$$

Unindo os resultados, temos o comportamento do operador $\langle \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle$:

$$\frac{d}{dt} \langle \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle = -i(\epsilon_i - \epsilon_j) \langle \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle - \frac{\gamma}{2} (g_{L,i} \chi_{L,i} + g_{L,j} \chi_{R,j} + g_{R,i} \chi_{R,i} + g_{R,j} \chi_{R,j}) \langle \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle \quad (3.91)$$

Através da expressão acima, vemos que o processo de relaxamento ocorrerá com uma taxa proporcional a $\chi_{L,k}$, com isso, observamos que diferentes modos do Hamiltoniano vão relaxar com taxas diferentes, com o processo sendo mais rápido quando menor foi a energia do modo fermiônico. A energia (ϵ_k) do modo fermiônico representa um gap de energia que deve ser superado na transição térmica. Modos com pequenos gaps experimentarão um número grande de transições até chegar ao equilíbrio, chegando neste estado assintótico mais rapidamente.

Podemos estudar o comportamento da ocupação do modo ϵ_k . Através de (3.91) encontramos:

$$\frac{d}{dt} \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle = \gamma g_{L,k} \chi_{L,k} (f_{L,k} - \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle) + \gamma g_{R,k} \chi_{R,k} (f_{R,k} - \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle) \quad , \quad (3.92)$$

onde $g_{L,k} = (S_{1,k}^{-1})^2$ e $g_{R,k} = (S_{N,k}^{-1})^2$. No estado estacionário onde $\frac{d}{dt} \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle = 0$ temos:

$$\langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle = \frac{g_{L,k} \chi_{L,k} f_{L,k} + g_{R,k} \chi_{R,k} f_{R,k}}{g_{L,k} \chi_{L,k} + g_{R,k} \chi_{R,k}}. \quad (3.93)$$

Na representação fermiônica a diferença de temperatura entre os banhos levará a um fluxo de partículas ao longo da cadeia. Na representação de *spin*, isto é relacionado a um fluxo de magnetização. É fácil ver que quando temos $T_L = T_R = T$, $\langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle = f_{T,k}$.

Para um pequeno gradiente de temperatura, temos uma leve mudança na ocupação do modo k . Como $\langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle$ contém duas funções dependentes da temperatura, temos:

$$\chi_{L,k}(T + \Delta T/2) = \chi_k(T) + \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \mathcal{O}((\Delta T)^2)$$

$$\chi_{R,k}(T - \Delta T/2) = \chi_k(T) - \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \mathcal{O}((\Delta T)^2)$$

$$f_{L,k}(T + \Delta T/2) = f_k(T) + \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial f_k}{\partial t} + \mathcal{O}((\Delta T)^2)$$

$$f_{R,k}(T - \Delta T/2) = f_k(T) - \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial f_k}{\partial t} + \mathcal{O}((\Delta T)^2) \quad ,$$

substituindo em (3.93)

$$\langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle = \frac{g_{L,k}(\chi_k(T) + \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial \chi_k}{\partial t})(f_k(T) + \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial f_k}{\partial t}) + g_{R,k}(\chi_k(T) - \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial \chi_k}{\partial t})(f_k(T) - \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial f_k}{\partial t})}{g_{L,k}(\chi_k(T) + \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial \chi_k}{\partial t}) + g_{R,k}(\chi_k(T) - \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial \chi_k}{\partial t})}$$

Simplificando a expressão, temos que para a ordem 0 em χ_k e primeira ordem em ΔT para f_k temos

$$\langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle = f_k + \frac{\Delta T}{2} \frac{g_{L,k} - g_{R,k}}{g_{L,k} + g_{R,k}} \quad .$$

Para primeira ordem em ΔT para χ_k e ordem 0 para f_k , temos $\langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle = 0$. Portanto, vemos que para uma pequena variação da temperatura, o termo que contribui em ordem ΔT é dado por

$$\langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle = f_k + \frac{\Delta T}{2} \left(\frac{g_{L,k} - g_{R,k}}{g_{L,k} + g_{R,k}} \right) \quad .$$

Para uma cadeia homogênea, temos $g_{L,k} = g_{R,k}$, o que implica em uma correção da ordem $(\Delta T)^2$ para a ocupação. Prosseguiremos a análise das correntes de energia e de partículas no sistema.

3.2.2 Correntes de Partículas e Energia

Para obtermos uma expressão para a corrente de magnetização/partículas, estudaremos o valor esperado do número total de férmions no sistema \mathcal{N} . Através da equação de continuidade, temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \mathcal{N} \rangle &= \frac{d}{dt} Tr \{ \mathcal{N} \rho \} \\ &= Tr \{ \mathcal{N} \mathcal{D}_L(\rho) \} + Tr \{ \mathcal{N} \mathcal{D}_R(\rho) \} \quad . \end{aligned} \quad (3.94)$$

No estado estacionário temos $\frac{d}{dt} \langle \mathcal{N} \rangle = 0$ e usando o fato que $\mathcal{N} = \sum_{k=1}^N \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k$, obtemos:

$$J_{\mathcal{N}} = \text{Tr} \{ \mathcal{N} \mathcal{D}_L(\rho) \} = -\text{Tr} \{ \mathcal{N} \mathcal{D}_R(\rho) \} \quad (3.95)$$

$$J_{\mathcal{N}} = \sum_k \gamma g_{L,k} \chi_{L,k} \left[f_{L,k} - \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle \right]$$

Substituindo o valor encontrado para $\langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle$ do estado estacionário (3.93), obtemos a corrente de partículas:

$$J_{\mathcal{N}} = \gamma \sum_k \frac{g_{L,k} \chi_{L,k} g_{R,k} \chi_{R,k}}{g_{L,k} \chi_{L,k} + g_{R,k} \chi_{R,k}} [f_{L,k} - f_{R,k}]. \quad (3.96)$$

Vamos estudar a corrente de magnetização para um pequeno gradiente de temperatura

$$T_L = T + \frac{\Delta T}{2} \quad T_R = T - \frac{\Delta T}{2}.$$

Substituindo as expansões feitas na pagina anterior, encontramos:

$$J_{\mathcal{N}} \approx \gamma \sum_k g_{L,k} g_{R,k} \frac{(\chi_k(T) + \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial \chi_k}{\partial t})(\chi_k(T) - \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial \chi_k}{\partial t})(f_k(T) + \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial f_k}{\partial t} - f_k(T) + \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial f_k}{\partial t})}{g_{L,k}(\chi_k(T) + \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial \chi_k}{\partial t}) + g_{R,k}(\chi_k(T) - \frac{\Delta T}{2} \frac{\partial \chi_k}{\partial t})}$$

Simplificando, obtemos:

$$J_{\mathcal{N}} \approx \gamma \sum_k g_{L,k} g_{R,k} \frac{(\chi_k^2 - \frac{(\Delta T)^2}{4} \partial \chi^2) \Delta T \partial f}{\chi_k (g_{L,k} + g_{R,k}) \left[1 + \frac{\Delta T}{2 \chi_k} \left(\frac{g_{L,k} - g_{R,k}}{g_{L,k} + g_{R,k}} \right) \partial \chi \right]}.$$

Reagrupando os termos em ordem ΔT , encontramos:

$$J_{\mathcal{N}} \approx \Delta T \sum_k \frac{g_{L,k} g_{R,k}}{g_{L,k} + g_{R,k}} \frac{\partial f}{\partial T} + \gamma \frac{(\Delta T)^2}{2} \sum_k \frac{g_{L,k} g_{R,k} (g_{R,k} - g_{L,k})}{(g_{R,k} + g_{L,k})^2} \frac{\partial \chi}{\partial T} \frac{\partial f}{\partial T} + \mathcal{O}((\Delta T)^{>2}).$$

Podemos reescrever esta expressao de uma forma mais amigável

$$J_{\mathcal{N}} = \gamma \Delta T J_1 + \gamma \frac{(\Delta T)^2}{2} J_2 + \dots,$$

substituindo as definições de $\chi_{L(R),k}$ e $f_{L(R),k}$, encontramos:

$$\frac{\partial f_k}{\partial T} = \frac{\epsilon_k}{T^2} \frac{e^{\frac{\epsilon_k}{T}}}{(e^{\frac{\epsilon_k}{T}} + 1)^2} = \frac{\epsilon_k}{T^2} \frac{1}{4 \cosh^2(\epsilon_k/2T)}.$$

Portanto, temos que

$$\chi_{L,k} \frac{\partial f}{\partial T} = \frac{|\epsilon_k|}{4T^2} \frac{1}{\sinh(\epsilon_k/2T) \cosh(\epsilon_k/2T)}.$$

Usando a propriedade envolvendo as funções hiperbólicas, temos $\sinh(a+b) = \cosh(a)\sinh(b) + \cosh(b)\sinh(a)$,

$$\sinh\left(\frac{\epsilon_k}{T}\right) = 2\cosh(\epsilon_k/2T)\sinh(\epsilon_k/2T)$$

$$J_1 = \sum_k \frac{g_{L,k}g_{R,k}}{g_{L,k} + g_{R,k}} \chi_{L,k} \frac{\partial f}{\partial T}$$

$$J_1 = \sum_k \frac{g_{L,k}g_{R,k}}{g_{L,k} + g_{R,k}} \frac{|\epsilon_k|}{2T^2} \operatorname{cosech}(\epsilon_k/T).$$

Para J_2 , temos

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \chi}{\partial T} = \operatorname{cosech}^2 \frac{|\epsilon_k|}{2T} \frac{|\epsilon_k|}{2T^2} \\ \frac{\partial f}{\partial T} = \frac{\epsilon_k}{4T^2} \frac{1}{\cosh^2(\epsilon_k/2T)} \end{array} \right.$$

o que leva ao resultado

$$\frac{\partial f}{\partial T} \frac{\partial \chi}{\partial T} = \frac{\epsilon_k |\epsilon_k|}{8T^4} \left(\frac{1}{\sinh(\epsilon_k/2T) \cosh(\epsilon_k/2T)} \right)$$

$$= \frac{\epsilon_k |\epsilon_k|}{8T^4} \frac{4}{\sinh^2(\epsilon_k/T)}$$

$$= \frac{\epsilon_k |\epsilon_k|}{2T^4} \operatorname{cosech}^2 \left(\frac{\epsilon_k}{T} \right)$$

$$J_2 = \sum_k \frac{g_{L,k}g_{R,k}(g_{R,k} - g_{L,k})}{(g_{L,k} + g_{R,k})^2} \frac{\epsilon_k |\epsilon_k|}{2T^4} \operatorname{cosech}^2 \left(\frac{\epsilon_k}{T} \right) .$$

Vemos que quando o sistema não apresenta o fenômeno de retificação, a corrente é uma função ímpar de ΔT . Observamos a presença de um termo proporcional a $(\Delta T)^2$, o qual será a menor contribuição para a retificação. Note que toda assimetria do sistema está contida nas grandezas $g_{R,k}$ e $g_{L,k}$.

Para estudarmos a corrente de energia, utilizaremos novamente a equação de continuidade, assim como foi feito para \mathcal{N} :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle H \rangle &= \frac{d}{dt} \text{Tr} \{ H \rho \} \\ &= \text{Tr} \{ H \mathcal{D}_L(\rho) \} + \text{Tr} \{ H \mathcal{D}_R(\rho) \} \quad . \end{aligned} \quad (3.97)$$

Como $H = \sum_k \epsilon_k \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k$, podemos fazer uma analogia com a equação (2.48):

$$J = \gamma \sum_k \epsilon_k \frac{g_{L,k} \chi_{L,k} g_{R,k} \chi_{R,k}}{g_{L,k} \chi_{L,k} + g_{R,k} \chi_{R,k}} [f_{L,k} - f_{R,k}] \quad . \quad (3.98)$$

Vemos que para se obter uma expressão para a corrente de calor, temos que diagonalizar a matriz W que representa as interações do sistema de interesse. A necessidade de introduzir assimetrias e interações mais complexas faz qualquer tratamento analítico para esse problema muito mais difícil. De fato, não temos conhecimento de nenhum artigo na literatura que trata exatamente da retificação térmica para este modelo. Parte do objetivo deste trabalho é estudar este fenômeno agregando conhecimento para a literatura. Nosso objetivo é estudar a retificação em um modelo que pode ser abordado analiticamente, para isso, temos que achar a matriz S tal que $W = S^\dagger \tilde{W} S$.

Para o caso homogêneo ($h_i = h$ e $\alpha_i = \alpha$) a diagonalização é possível para um valor de N arbitrário, nos fornecendo:

$$\begin{aligned} S_{l,k} &= \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin \left(\frac{kl\pi}{N+1} \right) \\ \epsilon_k &= h + 2\alpha \cos \left(\frac{k\pi}{N+1} \right) \end{aligned}$$

Para enxergarmos o fenômeno de retificação, temos que inverter os banhos térmicos, ou seja, fazendo $T_L \iff T_R$. Sendo assim, para se estudar uma expressão para o fluxo de calor teremos que inverter os termos $\chi_{L,k} \iff \chi_{R,k}$ e $f_{L,k} \iff f_{R,k}$ em (3.98). Definindo J_r o fluxo de calor com os banhos invertidos e fazendo as trocas mencionadas acima, obtemos:

$$J_r = \gamma \sum_k \epsilon_k \frac{g_{L,k} \chi_{R,k} g_{R,k} \chi_{L,k}}{g_{L,k} \chi_{R,k} + g_{R,k} \chi_{L,k}} [f_{R,k} - f_{L,k}] \quad (3.99)$$

Para o caso homogêneo, é fácil ver que $g_{L,k} = g_{R,k}$ e, conseqüentemente, $J = -J_r$.

É interessante comentar que o modelo XX possui uma analogia com o modelo harmônico clássico devido a forma quadrática do Hamiltoniano em termos dos operadores de criação e aniquilação (3.44). Para o modelo clássico, foi mostrado em [50] que não existe retificação térmica para qualquer que seja a forma de assimetria do sistema de interesse (aqui representada pelas massas e pelas interações das partículas). Para o modelo quântico com reservatórios *boundary driven*, foi mostrado em [46] a ausência de retificação

de magnetização para a cadeia XX . Com este resultado, os autores fazem uma menção ao modelo clássico como uma possível analogia devido a sua ausência de reificação.

Para comprovar a existência de retificação térmica, prosseguiremos uma abordagem analítica introduzindo leves assimetrias no sistema para tornar as equações (3.96) e (3.98) tratáveis.

3.2.3 Resultados Analíticos - Retificação Térmica da Cadeia XX

Com o processo de diagonalização vimos que para estudarmos as correntes de energia e partículas, é necessário diagonalizar o Hamiltoniano. A matriz de interação do sistema é tridiagonal e tendo em vista a dificuldade de se analisar os autovalores e autovetores de uma matriz genérica, encontramos na literatura resultados envolvendo leves assimetrias numa matriz tridiagonal $N \times N$. Em [58] o autor resolve analiticamente a seguinte matriz:

$$W = \begin{pmatrix} h - \delta & \delta & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \delta & h & \delta & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \delta & h & \delta & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \delta & h & \delta & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \delta & \ddots & \delta \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \delta & h + \delta \end{pmatrix}, \quad (3.100)$$

ou seja, esta matriz representa uma modificação do campo magnético do primeiro e do ultimo *spin*, mantendo o sistema com uma interação de troca de δ e campo magnético externo h para o interior da cadeia.

Utilizando o resultado presente em [58], obtemos:

$$v_l^k = \sin \left[\frac{(2l-1)(2k-1)\pi}{4N} \right] \quad (3.101)$$

$$\epsilon_k = h + 2\delta \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right]$$

onde v_l^k é a l -ésima componente do k -ésimo autovetor.

Calculando a normalização dos autovetores obtemos:

$$v_j^m = \sin \left[\frac{(2j-1)(2m-1)\pi}{4N} \right]$$

$$|A^m|^2 \sum_{j=1}^N \sin^2 \left[\frac{(2j-1)(2m-1)\pi}{4N} \right] = 1$$

$$|A^m|^2 \sum_{j=1}^N \left(\frac{e^{i(2j-1)(2m-1)\pi/4N} - e^{-i(2j-1)(2m-1)\pi/4N}}{2i} \right)^2 = 1$$

$$-|A^m|^2 \sum_{j=1}^N \left(\frac{e^{i(2j-1)(2m-1)\pi/2N} + e^{-i(2j-1)(2m-1)\pi/2N} - 2}{4} \right) = 1$$

$$\frac{-|A^m|^2}{4} \left[e^{-i(2m-1)\pi/2N} \sum_{j=1}^N e^{i(2m-1)j\pi/N} + e^{i(2m-1)\pi/2N} \sum_{j=1}^N e^{-i(2m-1)j\pi/N} - 2N \right] = 1.$$

Resolvendo o somatório acima, facilmente encontramos:

$$\begin{aligned} & \frac{-|A^m|^2}{4} \left[\frac{e^{-i(2m-1)\pi/2N} e^{-i(2m-1)\pi/N} (e^{-i(2m-1)\pi} - 1)}{e^{i(2m-1)\pi/N} - 1} \right. \\ & \quad \left. + \frac{e^{-i(2m-1)\pi/2N} e^{-i(2m-1)\pi/N} (e^{-i(2m-1)\pi} - 1)}{e^{i(2m-1)\pi/N} - 1} - 2N \right] = 1 \\ & \frac{-|A^m|^2}{4} \left[-2N - \frac{2e^{i(2m-1)\pi/2N}}{e^{i(2m-1)\pi/2N} (e^{i(2m-1)\pi/2N} - e^{-i(2m-1)\pi/2N})} \right. \\ & \quad \left. + \frac{2e^{-i(2m-1)\pi/2N}}{e^{-i(2m-1)\pi/2N} (e^{i(2m-1)\pi/2N} - e^{-i(2m-1)\pi/2N})} \right] = 1 \end{aligned}$$

Encontramos a normalização dos autovetores

$$\boxed{|A| = \sqrt{\frac{2}{N}}},$$

logo a matriz que diagonaliza o Hamiltoniano do sistema é dada por

$$S_{l,k} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sin \left[\frac{(2l-1)(2k-1)\pi}{4N} \right]. \quad (3.102)$$

Sabemos que a expressão para o fluxo de calor para quaisquer valores de temperatura é dada por (3.98). Para tornar mais clara a existência de retificação térmica, estudaremos

o limite de alto gradiente de temperatura com o objetivo de simplificar esta expressão. Consideraremos, neste primeiro momento, que o espectro é estritamente positivo, ou seja, $h > 0$ e $h > 2\delta$. Aqui no texto principal, mostraremos o resultado final, mas todo o procedimento analítico pode ser acompanhando no apêndice B.

A dependência na temperatura está contida em $\chi_{L,k}$ e $f_{l,k}$, portanto para o limite de $T_L \rightarrow \infty$ e $T_R \rightarrow 0$ temos os seguintes comportamentos:

$$\begin{aligned} f_{L,k} &= \frac{1}{e^{\epsilon_k/T_L} + 1} \rightarrow \frac{1}{2} \\ f_{R,k} &= \frac{1}{e^{\epsilon_k/T_R} + 1} \rightarrow 0 \end{aligned} \tag{3.103}$$

$$\begin{aligned} \chi_{L,k} &= \coth\left(\frac{|\epsilon_k|}{2T_L}\right) \rightarrow \infty \\ \chi_{R,k} &= \coth\left(\frac{|\epsilon_k|}{2T_R}\right) \rightarrow 1. \end{aligned}$$

Substituindo os resultados acima em (3.98) que representa o fluxo de calor (energia), obtemos seguinte expressão:

$$J = \frac{\gamma}{2} \sum_k \epsilon_k g_{R,k}. \tag{3.104}$$

Ao invertermos os reservatórios, por (3.99) encontramos a seguinte expressão:

$$J_r = -\frac{\gamma}{2} \sum_k \epsilon_k g_{L,k} \quad .$$

As quantidades acima podem ser calculadas utilizando os resultados da diagonalização do Hamiltoniano dado por (3.101). Encontramos que:

$$J = \frac{\gamma}{N} \sum_{k=1}^N \left(h + 2\delta \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \right) \left(\sin^2 \left[\frac{(2N-1)(2k-1)\pi}{4N} \right] \right)$$

e para o fluxo com os banhos invertidos, ou seja, fazendo $T_L \iff T_R$ encontramos, por (3.99), a seguinte expressão

$$J_r = -\frac{\gamma}{N} \sum_{k=1}^N \left(h + 2\delta \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \right) \left(\sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \right) \quad .$$

$$J_r = \frac{\gamma}{N} \sum_{k=1}^N \left(h + 2\delta \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \right) \left(\sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \right) \quad .$$

A soma acima pode ser acompanhada no apêndice B, o qual usamos a propriedade trigonométrica $\sin(a - b) = \sin(a)\cos(b) - \sin(b)\cos(a)$ e transformando em exponencial complexa, a qual se transforma em uma soma geométrica.

Com isso, encontramos os seguintes valores para os fluxos de calor:

$$J = \frac{\gamma(h + \delta)}{2}$$

$$J_r = -\frac{\gamma(h - \delta)}{2}$$

Logo, observamos que os fluxos são diferentes ao se inverter os banhos térmicos, portanto temos retificação térmica para a cadeia XX com a assimetria nos campos magnéticos externos do tipo (3.100). Sendo assim, mostramos que o fenômeno de retificação térmica aparece em sistemas quânticos com poucas componentes, com um Hamiltoniano quadrático e envolvendo apenas interações entre primeiros vizinhos. Além disso, nosso resultado mostra que independente do tamanho da cadeia, temos o fenômeno de retificação, ou seja, o fator de retificação permanece finito no limite termodinâmico.

Estudando outros comportamentos do espectro, para o caso estritamente negativo, $h < 0$ e $|h| > 2\delta$, é possível realizar a mesma análise apresentada acima, cujos procedimentos estão detalhados no apêndice B. As grandezas que envolvem as temperaturas se comportam da seguinte maneira quando $T_L \rightarrow \infty$ e $T_R \rightarrow 0$:

$$f_{L,k} = \frac{1}{e^{\epsilon_k/T_L} + 1} \rightarrow \frac{1}{2}$$

$$f_{R,k} = \frac{1}{e^{\epsilon_k/T_R} + 1} \rightarrow 1$$
(3.105)

$$\chi_{L,k} = \coth\left(\frac{|\epsilon_k|}{2T_L}\right) \rightarrow \infty$$

$$\chi_{R,k} = \coth\left(\frac{|\epsilon_k|}{2T_R}\right) \rightarrow 1$$

Resultando nas seguintes expressões para o fluxo de calor:

$$J = -\frac{\gamma}{2} \sum_k \epsilon_k g_{R,k}$$

$$J_r = \frac{\gamma}{2} \sum_k \epsilon_k g_{L,k}$$
(3.106)

Substituindo a diagonalização e realizando as contas, assim como no caso do espectro positivo, obtemos os seguintes valores para os fluxos de calor:

$$J = \frac{\gamma(|h| - \delta)}{2}$$

$$J_r = -\frac{\gamma(|h| + \delta)}{2}$$

Novamente enxergamos a existência de retificação térmica. Notamos que o maior fluxo de calor é quando o banho quente está conectado ao campo magnético menos intenso.

Para o caso de um espectro contendo valores positivos e negativos, foi realizado um estudo envolvendo uma interação forte entre os sítios. Se escolhermos α grande o suficiente, podemos dividir o espectro de energia em valores positivos e negativos. Mais especificamente, de acordo com (3.101), se γ assumir o seguinte valor

$$\gamma > \frac{h}{2} \left| \sec \left[\frac{(N+1)\pi}{2N} \right] \right|,$$

o espectro de energia é dividido em $N/2$ valores positivos e $N/2$ valores negativos de energia. No regime de alto gradiente de temperatura, temos a seguinte expressão para a corrente de calor

$$J = \frac{\gamma}{2} \left[\sum_{k=1}^{N/2} \epsilon_k g_{R,k} - \sum_{k=N/2+1}^N \epsilon_k g_{R,k} \right].$$

Realizando os cálculos temos o seguinte resultado:

$$J = \frac{\gamma}{N} \csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \left[\delta + \frac{h}{2} \right].$$

E para o fluxo de calor com os banhos trocados, temos a expressão

$$J = -\frac{\gamma}{2} \left[\sum_{k=1}^{N/2} \epsilon_k g_{L,k} - \sum_{k=N/2+1}^N \epsilon_k g_{L,k} \right],$$

nos fornecendo o valor para o fluxo

$$J_r = -\frac{\gamma}{N} \csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \left[\delta - \frac{h}{2} \right].$$

Novamente temos retificação térmica, e comparando com o resultado obtido através do espectro estritamente positivo, vemos que para uma interação forte entre os spins, a diferença entre as magnitudes do fluxo de calor depende do campo magnético. Note que, novamente temos o transporte balístico da energia, pois desde que $N \rightarrow \infty$ a corrente converge para um valor diferente de zero

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\gamma}{N} \csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) = \frac{2\gamma}{\pi}.$$

O modelo analítico derivado também permite estudar computacionalmente sistemas grandes, desta forma fizemos um cálculo numérico no Software MatLab para estudar a retificação em modelos mais assimétricos (dado pela matriz W) e para sistemas de diversos tamanhos. Realizamos simulações numéricas, apresentadas nas figuras abaixo, para uma junção de dois sistemas com interações entre sítios distintas:

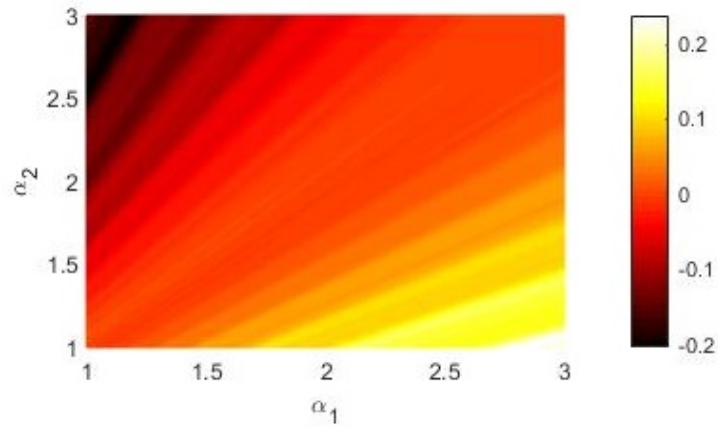


Figura 3 – Perfil de retificação para junção de dois sistemas. $N=50$ e $\Delta T = 10$

O mesmo cálculo numérico para a junção de dois sistemas submetidos a campos magnéticos diferentes:

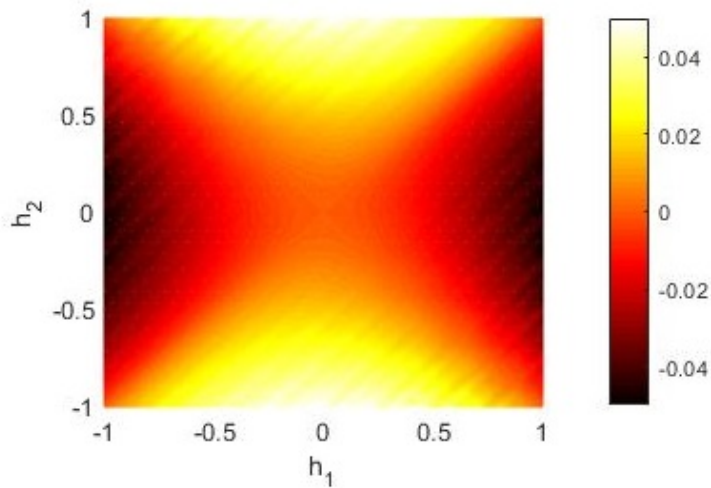


Figura 4 – Perfil de retificação para junção de dois sistemas, agora variando o campo magnético externo. $N=50$ e $\Delta T = 10$

Neste estudo, usamos a seguinte definição de retificação:

$$\mathcal{R} = \frac{J + J_r}{\min\{J, J_r\}} \quad .$$

Todos os resultados do modelo analítico derivado foram publicados na *Physical Review E*: DOI: 10.1103/PhysRevE.102.062146.

Heat Rectification on the XX chain

Saulo H. S. Silva¹, Gabriel T. Landi², Raphael C. Drumond³ and Emmanuel Pereira^{1*}

¹*Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas,
Universidade Federal de Minas Gerais, 30123-970, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil*

²*Instituto de Física da Universidade de São Paulo, 05314-970 São Paulo, Brazil*

³*Departamento de Matemática, Instituto de Ciências Exatas,
Universidade Federal de Minas Gerais, 30123-970, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil*

In order to better understand the minimal ingredients for thermal rectification, we perform a detailed investigation of a simple spin chain, namely, the open XX model with a Lindblad dynamics involving global dissipators. We use a Jordan-Wigner transformation to derive a mathematical formalism to compute the heat currents and other properties of the steady state. We have rigorous results to prove the occurrence of thermal rectification even for slightly asymmetrical chains. Interestingly, we describe cases where the rectification does not decay to zero as we increase the system size, that is, the rectification remains finite in the thermodynamic limit. We also describe some numerical results for more asymmetrical chains. The presence of thermal rectification in this simple model indicates that the phenomenon is of general occurrence in quantum spin systems.

PACS numbers: 05.70.Ln, 05.60.Gg, 75.10.Pq

Figura 5 – Artigo publicado [59] -*Physical Review E*: DOI: 10.1103/PhysRevE.102.062146

4 *Dephasing* na cadeia XX -Análise de Sistemas *graded* e potenciais Quase Periódicos

Neste capítulo estudaremos o comportamento da cadeia XX na presença de reservatórios térmicos e um tipo de ruído em sistemas quânticos: *dephasing*. É interessante comentar que nesse contexto, o efeito do *dephasing* no transporte quântico tem ganhando atenção na literatura e possui resultados extremamente interessantes. Em particular, um problema a ser considerado nesta parte do trabalho, é o efeito do *dephasing* na retificação da corrente de spin.

Este tipo de ruído no transporte foi investigado recorrentemente, principalmente em sistemas *Boundary-Driven* e, como exemplo, citamos resultados interessantes descritos na Ref [60,61]: para quaisquer intensidade de *dephasing* diferente de zero, o regime de transporte se tornam difusos no limite termodinâmico. Na Ref. [53], é demonstrado que a interação entre *dephasing* e um tipo particular de potencial, ou seja, potenciais quase periódicos, aumenta o transporte, resultando em um aumento da sua condutividade. Na Ref. [62] uma investigação detalhada do fluxo de calor na cadeia XXZ é executada na presença de *dephasing* em todos os sítios, tanto na presença de interação fraca quanto na forte. Nesse contexto, nosso foco nesta parte da Tese é ir além dos sistemas *Boundary-Driven* e estudar o comportamento da corrente de spin na presença deste ruído e banhos térmicos para induzir o sistema a um estado estacionário de não equilíbrio.

4.1 Modelo Microscópico

Vamos considerar que o Hamiltoniano da cadeia XX esteja acoplado a um dissipador que preserva as ocupações, ou seja, os elementos da diagonal principal da matriz densidade permanecem constante na evolução temporal e os elementos fora da diagonal são perturbados. Este dissipador, chamado de *dephasing* é dado por:

$$\mathcal{D}^{deph}(\rho) = \frac{\Gamma}{2} (\sigma^z \rho \sigma^z - \rho) \quad . \quad (4.1)$$

Deduzimos para a cadeia XX nos capítulos anteriores os dissipadores em termos dos novos operadores fermiônicos que surgiram da diagonalização do Hamiltoniano. Relembrando, temos que

$$\mathcal{H} = \sum_k \epsilon \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \quad (4.2)$$

e

$$\eta_i = \sum_{l=1}^N S_{i,l}^{-1} \tilde{\eta}_l \quad \eta_i^\dagger = \sum_{l=1}^N S_{i,l}^{-1} \tilde{\eta}_l^\dagger \quad . \quad (4.3)$$

Para realizar o procedimento analítico e obter as expressões para esse modelo, trabalharemos primeiramente nas componentes η e posteriormente, usando a transformação (4.3) utilizaremos os novos operadores fermiônicos($\tilde{\eta}$).

Deduzimos anteriormente que os operadores fermiônicos possuem propriedades úteis para analisar comutadores, são elas:

$$[\eta_i^\dagger \eta_j, \eta_n] = -\delta_{i,n} \eta_j \quad (4.4)$$

$$[\eta_i^\dagger \eta_j, \eta_n^\dagger] = \delta_{j,n} \eta_i^\dagger \quad .$$

Para auxiliar o cálculo das correntes na presença de *dephasing*, utilizaremos os dissipador adjunto deduzido no capítulo anterior. Para algum operador \mathcal{O} temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \mathcal{O} \rangle &= Tr \left\{ \mathcal{O} \frac{d\rho}{dt} \right\} \\ &= -i Tr \{ \mathcal{O} [\mathcal{H}, \rho] \} + Tr \{ \mathcal{O} \mathcal{D}(\rho) \} \quad . \end{aligned}$$

Note que podemos escrever:

$$\begin{aligned} \tilde{D}[L](\mathcal{O}) &= L^\dagger \mathcal{O} L - \frac{1}{2} L^\dagger L \mathcal{O} - \frac{1}{2} \mathcal{O} L^\dagger L \\ \tilde{D}[L](\mathcal{O}) &= \frac{1}{2} L^\dagger [\mathcal{O}, L] + \frac{1}{2} [L^\dagger, \mathcal{O}] L \quad . \end{aligned} \quad (4.5)$$

Para descrever a evolução temporal via equação de Lindblad, ao invés de analisar a matriz densidade ($2^N \times 2^N$), caracterizaremos o sistema através da matriz de covariância definida como

$$C_{ij} = \langle \eta_j^\dagger \eta_i \rangle. \quad (4.6)$$

É interessante ressaltar que a matriz de covariância não leva em consideração os primeiros momentos (η_i) e as correlações $\langle \eta_j^\dagger \eta_i^\dagger \rangle$, mas de acordo com (3.73) vemos que essa grandeza se anula no estado estacionário.

Podemos obter uma evolução temporal para a matriz de covariância através da equação de Lindblad. Temos

$$\frac{d}{dt} \langle \eta_n^\dagger \eta_m \rangle = i \langle [\mathcal{H}, \eta_n^\dagger \eta_m] \rangle + Tr \{ \eta_n^\dagger \eta_m \mathcal{D}^L \} + Tr \{ \eta_n^\dagger \eta_m \mathcal{D}^R \} \quad . \quad (4.7)$$

Note que os dissipadores $\mathcal{D}^{L(R)}$ atuam nos auto-estados do Hamiltoniano e estão em função de $\tilde{\eta}$. Para escrever uma evolução temporal para a matriz de covariância, temos que analisar duas situações: a matriz de covariância na forma \tilde{C} e na forma usual C . Utilizando as relações entre os operadores $\tilde{\eta}$ e η temos que:

$$\begin{aligned}
 \tilde{C}_{ij} &= \langle \tilde{\eta}_j^\dagger \tilde{\eta}_i \rangle \\
 \tilde{C}_{ij} &= \left\langle \sum_{kl} S_{lj}^{-1} S_{ik} \eta_l^\dagger \eta_k \right\rangle \\
 \tilde{C}_{ij} &= \sum_{kl} S_{lj}^{-1} \langle \eta_l^\dagger \eta_k \rangle S_{ik} \\
 \tilde{C}_{ij} &= \sum_{kl} S_{lj}^{-1} C_{kl} S_{ik} \\
 \tilde{C}_{ij} &= \sum_{kl} S_{ik} C_{kl} S_{lj}^{-1} \\
 \tilde{C}_{ij} &= \sum_l (SC)_{il} S_{lj}^{-1} \\
 \tilde{C}_{ij} &= (SCS^{-1})_{ij} \quad ,
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

logo vemos que a matriz de covariância nos novos operadores fermiônicos é dada por $\tilde{C} = SCS^{-1}$.

Pela equação de Lindblad, temos

$$\frac{d}{dt} \rho = -i[\mathcal{H}, \rho] + \sum_k D_k^{L(R)} \quad , \tag{4.9}$$

onde $D_k^{L(R)}$ é dado por

$$\begin{aligned}
 D_k^L &= \gamma (S_{1,k}^{-1})^2 \chi_{L,k} \left\{ (1 - f_{L,k}) \left[\tilde{\eta}_k \rho \tilde{\eta}_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \} \right] \right. \\
 &\quad \left. + f_{L,k} \left[\tilde{\eta}_k^\dagger \rho \tilde{\eta}_k - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \} \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

e para o lado direito (R) temos

$$\begin{aligned}
 D_k^R &= \gamma (S_{N,k}^{-1})^2 \chi_{R,k} \left\{ (1 - f_{R,k}) \left[\tilde{\eta}_k e^{i\pi N} \rho e^{i\pi N} \tilde{\eta}_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \} \right] \right. \\
 &\quad \left. + f_{R,k} \left[\tilde{\eta}_k^\dagger e^{i\pi N} \rho e^{i\pi N} \tilde{\eta}_k - \frac{1}{2} \{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \} \right] \right\} .
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

Vamos definir grandezas auxiliares para ajudar na derivação das expressões futuras:

$$A_L^k = \gamma (g_{Lk})^2 \chi_{L,k}(1 - f_{L,k}) \quad B_L^k = \gamma (g_{Lk})^2 \chi_{L,k} f_{L,k} \quad (4.12)$$

$$A_R^k = \gamma (g_{Rk})^2 \chi_{R,k}(1 - f_{R,k}) \quad B_R^k = \gamma (g_{Rk})^2 \chi_{R,k} f_{R,k} \quad ,$$

onde $g_{L(R)k} = (S_{1(N),k}^{-1})^2$. Com o objetivo de calcular (4.7), temos:

$$\begin{aligned} [H, \eta_n^\dagger \eta_m] &= [H, \eta_n^\dagger] \eta_m + \eta_n^\dagger [H, \eta_m] \\ &= \sum_{ij} \left\{ H_{ij} [\eta_i^\dagger \eta_j, \eta_m] \eta_m + H_{ij} \eta_n^\dagger [\eta_i^\dagger \eta_j, \eta_m] \right\} \\ &= \sum_{ij} \left\{ H_{ij} \eta_i^\dagger \eta_m \delta_{jn} - H_{ij} \eta_n^\dagger \eta_j \delta_{im} \right\} \\ &= \sum_i H_{in} \eta_i^\dagger \eta_m - \sum_j H_{mj} \eta_n^\dagger \eta_j \quad , \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde foram usados os resultados (3.63) e (3.64). No processo de diagonalização do Hamiltoniano, definimos os novos operadores fermiônicos dados por (4.3). Note que podemos escrever:

$$\eta_n^\dagger \eta_m = \sum_{ij} S_{in} S_{mj}^{-1} \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \quad . \quad (4.14)$$

Vamos avaliar cada termo da equação de Lindblad em (4.9):

- Para o Termo $Tr \left\{ \eta_n^\dagger \eta_m D_k^L \right\}$

$$Tr \left\{ \eta_n^\dagger \eta_m D_k^L \right\} = \sum_{ij} S_{in} S_{mj}^{-1} Tr \left\{ \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j D_k^L \right\} \quad , \quad (4.15)$$

onde o dissipador é dado por

$$D_k^L = A_L^k \left[\tilde{\eta}_k \rho \tilde{\eta}_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k, \rho \right\} \right] + B_L^k \left[\tilde{\eta}_k^\dagger \rho \tilde{\eta}_k - \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\eta}_k \tilde{\eta}_k^\dagger, \rho \right\} \right] \quad . \quad (4.16)$$

Utilizando as propriedades do dissipador adjunto derivadas no capítulo anterior, temos que para a primeira parte envolvendo o fator A_L^k :

$$D_k[\tilde{\eta}_k](\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j) = \frac{1}{2} \tilde{\eta}_k^\dagger \left[\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j, \tilde{\eta}_k \right] + \frac{1}{2} \left[\tilde{\eta}_k^\dagger, \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \right] \tilde{\eta}_k \quad . \quad (4.17)$$

Pelas propriedades (3.63),

$$D_k[\tilde{\eta}_k](\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j) = -\frac{1}{2}(\delta_{ik} + \delta_{jk}) \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \quad . \quad (4.18)$$

Para a parte do dissipador referente ao termo B_L^k encontramos

$$D_k[\tilde{\eta}_k^\dagger](\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j) = \frac{1}{2} \tilde{\eta}_k \left[\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j, \tilde{\eta}_k^\dagger \right] + \frac{1}{2} \left[\tilde{\eta}_k, \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j \right] \tilde{\eta}_k^\dagger \quad , \quad (4.19)$$

e utilizando novamente (3.63)

$$D_k[\tilde{\eta}_k^\dagger](\tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j) = \frac{1}{2}(\delta_{ik} + \delta_{jk}) \tilde{\eta}_j \tilde{\eta}_i^\dagger \quad . \quad (4.20)$$

Dessa fora, em conjunto com a relação de anti-comutação para os operadores fermiônicos, temos :

$$\begin{aligned} Tr \left\{ \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j D_k^L \right\} &= -\frac{A_L^k}{2} \delta_{ik} \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle - \frac{A_L^k}{2} \delta_{jk} \langle \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle \\ &\quad - \frac{B_L^k}{2} \delta_{ik} \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle - \frac{B_L^k}{2} \delta_{ik} \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle \\ &\quad + \frac{B_L^k}{2} (\delta_{ik} + \delta_{jk}) \delta_{ij} \quad . \end{aligned} \quad (4.21)$$

De maneira análoga, podemos realizar o procedimento para o dissipador relacionado ao lado direito. Logo, concluímos que

$$\begin{aligned} Tr \left\{ \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j D_k^R \right\} &= -\frac{A_R^k}{2} \delta_{ik} \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle - \frac{A_R^k}{2} \delta_{jk} \langle \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle \\ &\quad - \frac{B_R^k}{2} \delta_{ik} \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle - \frac{B_R^k}{2} \delta_{ik} \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle \\ &\quad + \frac{B_R^k}{2} (\delta_{ik} + \delta_{jk}) \delta_{ij} \quad . \end{aligned} \quad (4.22)$$

Tendo em vista (4.22), vamos definir um conjunto de matrizes para reescrever (4.7) numa equação diferencial matricial. Seja

$$\mathcal{M} = \frac{1}{2} \text{diag} \left(A_1^L + A_1^R + B_1^L + B_1^R, A_2^L + A_2^R + B_2^L + B_2^R, \dots \right)$$

e

$$\mathcal{B} = \text{diag} \left(B_1^L + B_1^R, B_2^L + B_2^R, \dots \right) \quad ,$$

de tal modo que podemos escrever:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{ijk} S_{in} S_{mj}^{-1} Tr \left\{ \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j (D_k^L + D_k^R) \right\} = \\
 & - \sum_{ijk} S_{in} S_{mj}^{-1} \mathcal{M}_{ik} \tilde{C}_{jk} - \sum_{ijk} S_{in} S_{mj}^{-1} \mathcal{M}_{jk} \tilde{C}_{ki} \\
 & = - \sum_{ijk} S_{ni}^{-1} S_{jm} \mathcal{M}_{ik} \tilde{C}_{jk} - \sum_{ijk} S_{in} S_{mj}^{-1} \mathcal{M}_{jk} \tilde{C}_{jk} \\
 & = - \sum_{jk} \left(S^{-1} \mathcal{M} \right)_{nk} S_{mj}^{-1} \tilde{C}_{jk} - \sum_{ik} S_{in} \left(S^{-1} \mathcal{M} \right)_{mk} \tilde{C}_{ki} \quad (4.23) \\
 & = - \sum_k \left(S^{-1} \mathcal{M} \right)_{nk} \left(S^{-1} \tilde{C} \right)_{mk} - \sum_k \left(S^{-1} \mathcal{M} \right)_{mk} \left(\tilde{C} S \right)_{kn} \\
 & = - \sum_k \left(\mathcal{M} S \right)_{kn} \left(S^{-1} \tilde{C} \right)_{mk} - \sum_k \left(S^{-1} \mathcal{M} \right)_{mk} \left(\tilde{C} S \right)_{kn} \\
 & = - \left(S^{-1} \tilde{C} \mathcal{M} S \right)_{mn} - \left(S^{-1} \mathcal{M} \tilde{C} S \right)_{mn} \quad ,
 \end{aligned}$$

onde usamos que $\tilde{C}_{jk} = \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_j \rangle$ e $(AB)^T = B^T A^T$. Para o termo da matriz \mathcal{B} , temos:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_{ijk} S_{in} S_{mj}^{-1} \delta_{ik} \delta_{ij} (\mathcal{B}_k^L + \mathcal{B}_k^R) + \frac{1}{2} \sum_{ijk} S_{in} S_{mj}^{-1} (\mathcal{B}_k^L + \mathcal{B}_k^R) \delta_{jk} \delta_{ij} \\
 & = \frac{1}{2} \sum_{ij} S_{in} S_{mj}^{-1} \delta_{ij} (\mathcal{B}_i^L + \mathcal{B}_i^R) + \frac{1}{2} \sum_{ij} S_{in} S_{mj}^{-1} (\mathcal{B}_j^L + \mathcal{B}_j^R) \delta_{ij} \\
 & = \frac{1}{2} \sum_i S_{mi}^{-1} \mathcal{B}_{ii} S_{in} + \frac{1}{2} \sum_j S_{mi}^{-1} \mathcal{B}_{jj} S_{in} \\
 & = \left(S^{-1} \mathcal{B} S \right)_{mn} \quad .
 \end{aligned} \quad (4.24)$$

Agrupando (4.23) e (4.24), encontramos:

$$\sum_{ijk} S_{in} S_{mj}^{-1} Tr \left\{ \tilde{\eta}_i^\dagger \tilde{\eta}_j (D_k^L + D_k^R) \right\} = - \left(S^{-1} \tilde{C} M S \right)_{mn} - \left(S^{-1} M \tilde{C} S \right)_{mn} + \left(S^{-1} B S \right)_{mn} . \quad (4.25)$$

Sendo assim, reunindo os resultados (4.13) e (4.25) encontramos a evolução temporal da matriz de covariância do sistema:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \eta_n^\dagger \eta_m \rangle &= \frac{d}{dt} C_{mn} = - \sum_i (-i) H_{in} C_{mi} - i \sum_j H_{mj} C_{jn} \\ &\quad - \left(S^{-1} \tilde{C} M S \right)_{mn} - \left(S^{-1} M \tilde{C} S \right)_{mn} + \left(S^{-1} B S \right)_{mn} . \end{aligned}$$

Note que nesta equação temos as duas formas da matriz, dadas por \tilde{C} e C . Usando que $\tilde{C} = S C S^{-1}$, temos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} C_{mn} &= - \left(C \tilde{H}^\dagger \right)_{mn} - \left(\tilde{H} C \right)_{mn} - \left(S^{-1} S C S^{-1} M S \right)_{mn} \\ &\quad - \left(S M S C S^{-1} S \right)_{mn} + \left(S^{-1} B S \right)_{mn} , \end{aligned} \quad (4.26)$$

onde $\tilde{H} = iH$. Note que encontramos uma equação de Lyapunov para a matriz de covariância:

$$\frac{d}{dt} C = - \left(\tilde{H}^\dagger S M S \right) C - C \left(\tilde{H}^\dagger + S M S \right) + S^{-1} B S \quad (4.27)$$

$$\frac{d}{dt} C = - \left[W C + C W^\dagger \right] + F ,$$

onde definimos

$$W = iH + S^{-1} M S$$

$$F = S^{-1} B S ,$$

as quais são matrizes dependentes da temperatura.

No estado estacionário de não equilíbrio, temos $dC/dt = 0$, logo a matriz de covariância satisfaz

$$W C + C W^\dagger = F \quad (4.28)$$

Note que todas as grandezas obtidas no capítulo anterior podem ser escritas em termos da solução da equação de Lyapunov acima. Nas próximas sessões faremos essa abordagem.

4.2 Análise Numérica do *NESS*

A equação de Lyapunov é amplamente utilizada para solucionar problemas envolvendo teoria de controle. Desse modo, muitos pacotes numéricos foram desenvolvidos para aprimorar sua solução, tendo como base o algoritmo de Bartles-Stewart [63]. Apesar do *Mathematica* possuir uma função interna para solucionar este problema (*LyapunovSolve*), preferimos produzir o programa para realizar este procedimento.

Para isto, utilizaremos o processo de vetorização caracterizado pelo seguinte exemplo:

$$\text{vec} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ c \\ b \\ d \end{pmatrix} . \quad (4.29)$$

De uma forma geral, o operador *vec* mapeia uma matriz $N \times N$ em um vetor N^2 . A operação de vetorização possui várias outras propriedades. Para o produto de três matrizes temos

$$\text{vec}(ABC) = (C^T \otimes A) \text{vec}(B) , \quad (4.30)$$

se $C = \mathcal{I}$ temos

$$\text{vec}(AB) = (\mathcal{I} \otimes A) \text{vec}(B) . \quad (4.31)$$

Estas propriedades podem ser utilizadas para vetorizar a expressão (4.28). Obtemos

$$(\mathcal{I} \otimes W + W^* \otimes \mathcal{I}) \text{vec}(C) = \text{vec}(F) , \quad (4.32)$$

que possui a forma de um sistema linear $Ax = b$, onde $x = \text{vec}(C)$.

```
NEye[n_]:=SparseArray[{{i_,i_}->1},{n,n}];

vectorization[M_]:=Flatten[Transpose[M]]
unvectorization[M_]:=Module[{L},
L=Length@M;
Transpose[Partition[M,Sqrt[L]]]
]
|
```

Figura 6 – Programa produzido para realizar o procedimento de vetorização.

Para realizar a solução do sistema linear em (4.32) foi feito o seguinte código:

```

solveNESS[ $\mathcal{H}$ _,  $\chi$ _, {TL_, TR_}] := Module[{L, ek, S, Sinv, glk, grk, M, B, W, F, vecW, vecF},
  L = Length[ $\mathcal{H}$ ];
  { $\Lambda$ , S} = Quiet[Eigensystem[ $\mathcal{H}$ ]];
  ek[j_] := N[ $\Lambda$ [[j]]];
  Sinv = Inverse[S];
  glk[m_] := Sinv[[1, m]]^2;
  grk[m_] := Sinv[[L, m]]^2;

  M = Table[If[i == j, (1/2) * (glk[i] *  $\chi$ Lk[TL, ek[i]] + grk[i] *  $\chi$ Rk[TR, ek[i]])], 0], {i, 1, L}, {j, 1, L}];
  B = Table[If[i == j, ( $\chi$ Lk[TL, ek[i]] * glk[i] * fLk[TL, ek[i]] +  $\chi$ Rk[TR, ek[i]] * grk[i] * fRk[TR, ek[i]])], 0], {i, 1, L}, {j, 1, L}];

  W = I  $\mathcal{H}$  + Inverse[S].M.S;
  F = Inverse[S].B.S;
  vecW = kron[Conjugate[W], NEye[L]] + kron[NEye[L], W];
  vecF = Table[Flatten[Transpose[F]][[i]], {i, 1, L^2}];

  Chop[unvectorization[LinearSolve[vecW, vecF]]];
];
    
```

Figura 7 – Programa produzido para solucionar a equação de Lyapunov.

4.3 Corrente de Partículas e Corrente de Energia

Nesta seção, faremos a análise das correntes de partículas e energia para este modelo. Note que ainda não introduzimos o dissipador do *dephasing*, portanto através da equação de continuidade obtemos

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle \mathcal{N} \rangle &= \frac{d}{dt} Tr \{ \mathcal{N} \rho \} \\
 &= Tr \{ \mathcal{N} \mathcal{D}_L(\rho) \} + Tr \{ \mathcal{N} \mathcal{D}_R(\rho) \}
 \end{aligned} \tag{4.33}$$

No estado estacionário temos $\frac{d}{dt} \langle \mathcal{N} \rangle = 0$ e usando o fato que $\mathcal{N} = \sum_{k=1}^N \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k$, encontramos:

$$J_{\mathcal{N}} = Tr \{ \mathcal{N} \mathcal{D}_L(\rho) \} = -Tr \{ \mathcal{N} \mathcal{D}_R(\rho) \} \tag{4.34}$$

$$J_{\mathcal{N}} = \sum_k \gamma_{L,k} \chi_{L,k} \left[f_{L,k} - \langle \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k \rangle \right],$$

que em termos da matriz de covariância é escrita como

$$J_{\mathcal{N}} = \sum_k \gamma_{L,k} \chi_{L,k} \left[f_{L,k} - \tilde{C}_{kk} \right]. \tag{4.35}$$

Para a corrente de energia, similarmente encontramos

$$J = \sum_k \gamma_{\epsilon,k} g_{L,k} \chi_{L,k} \left[f_{L,k} - \tilde{C}_{kk} \right]. \tag{4.36}$$

Na presença de *dephasing*, temos que avaliar novamente as expressões das correntes contabilizando a contribuição do novo dissipador:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \mathcal{N} \rangle &= \frac{d}{dt} \text{Tr} \{ \mathcal{N} \rho \} \\ &= \text{Tr} \{ \mathcal{N} \mathcal{D}_L(\rho) \} + \text{Tr} \{ \mathcal{N} \mathcal{D}_R(\rho) \} + \text{Tr} \{ \mathcal{N} \mathcal{D}^{deph}(\rho) \} \quad . \end{aligned} \quad (4.37)$$

Os dois primeiros termos já foram calculados anteriormente e temos que avaliar a influência do terceiro termo que está em função dos operadores fermiônicos (η) e portanto necessitamos usar as relações que envolvem os operadores $\tilde{\eta}$ e η . Note que através de (4.3), temos

$$\mathcal{N} = \sum_{k=1}^N \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k = \sum_{knm} S_{nk}^\dagger S_{km} \eta_n^\dagger \eta_m \quad . \quad (4.38)$$

Unindo ao termo do *dephasing* temos

$$\text{Tr} \{ \mathcal{N} D_i^{deph} \} = \sum_{knm} S_{nk}^\dagger S_{km} \text{Tr} \{ \eta_n^\dagger \eta_m D_i^{deph} \} \quad , \quad (4.39)$$

onde podemos usar a propriedade do dissipador adjunto (3.65)

$$D \left[\eta_i^\dagger \eta_i \right] (\eta_n^\dagger \eta_m) = \frac{1}{2} \eta_i^\dagger \eta_i \left[\eta_n^\dagger \eta_m, \eta_i^\dagger \eta_i \right] + \frac{1}{2} \left[\eta_i^\dagger \eta_i, \eta_n^\dagger \eta_m \right] \eta_i^\dagger \eta_i \quad . \quad (4.40)$$

Usando as propriedades dos operadores fermiônicos (3.63) e (3.64) temos:

$$\begin{aligned} \left[\eta_i^\dagger \eta_i, \eta_n^\dagger \eta_m \right] &= \left[\eta_i^\dagger \eta_i, \eta_n^\dagger \right] \eta_m + \eta_n^\dagger \left[\eta_i^\dagger \eta_i, \eta_m \right] \\ \left[\eta_i^\dagger \eta_i, \eta_n^\dagger \right] &= \delta_{in} \eta_i^\dagger \\ \left[\eta_i^\dagger \eta_i, \eta_m \right] &= -\delta_{im} \eta_i \\ \left[\eta_i^\dagger \eta_i, \eta_n^\dagger \eta_m \right] &= (\delta_{in} - \delta_{im}) \eta_n^\dagger \eta_m \quad , \end{aligned} \quad (4.41)$$

onde foi usado que $\delta_{ij} F_{jk} = \delta_{ij} F_{ik}$. Portanto, temos que

$$\begin{aligned} D_i^{deph} \left[\eta_i^\dagger \eta_i \right] (\eta_n^\dagger \eta_m) &= \frac{1}{2} [(\delta_{im} - \delta_{in})] \eta_i^\dagger \eta_i \eta_n^\dagger \eta_m \\ &+ \frac{1}{2} [(\delta_{in} - \delta_{im})] \eta_n^\dagger \eta_m \eta_i^\dagger \eta_i \\ &= \frac{1}{2} [(\delta_{im} - \delta_{in})] \left[\eta_i^\dagger \eta_i, \eta_n^\dagger \eta_m \right] \quad . \end{aligned} \quad (4.42)$$

Reagrupando os resultados (4.41), temos

$$D_i^{deph}[\eta_i^\dagger \eta_i](\eta_n^\dagger \eta_m) = -\frac{1}{2} [\delta_{im} + \delta_{in} - 2\delta_{in}\delta_{im}] \eta_n^\dagger \eta_m \quad , \quad (4.43)$$

que por fim nos fornece o dissipador do *dephasing*:

$$\sum_i D_i^{deph}[\eta_i^\dagger \eta_i](\eta_n^\dagger \eta_m) = -(1 - \delta_{nm}) \eta_n^\dagger \eta_m \quad . \quad (4.44)$$

Dando continuidade para a corrente de partículas, encontramos:

$$\begin{aligned} \sum_i Tr \{ \mathcal{N} D_i^{deph} \} &= \sum_{iknm} S_{nk}^\dagger S_{km} Tr \{ \eta_n^\dagger \eta_m D_i^{deph} \} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{iknm} S_{nk}^\dagger S_{km} [\delta_{im} + \delta_{in} - 2\delta_{in}\delta_{im}] \eta_n^\dagger \eta_m \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{ikn} S_{nk}^\dagger S_{km} \eta_n^\dagger \eta_i - \frac{1}{2} \sum_{ikm} S_{km} \eta_i^\dagger \eta_m + \sum_{ik} S_{ik}^\dagger \eta_i^\dagger \eta_i \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{ikn} S_{nk}^\dagger S_{ki} C_{in} - \frac{1}{2} \sum_{ikm} S_{ik}^\dagger S_{km} C_{mi} + \sum_{ik} S_{ik}^\dagger S_{ki} C_{ii} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{in} (S^\dagger S)_{ni} C_{in} - \frac{1}{2} \sum_{im} (S^\dagger S)_{im} C_{mi} + \sum_i (S^\dagger S)_{ii} C_{ii} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_n C_{nn} - \frac{1}{2} \sum_m C_{mm} + \sum_i C_{ii} = 0 \quad . \end{aligned} \quad (4.45)$$

Concluimos então que a presença do *dephasing* não altera a equação de continuidade para a corrente de partículas/spin. Logo a expressão final é dada por

$$J_N = \sum_k \gamma g_{L,k} \chi_{L,k} [f_{L,k} - \tilde{C}_{kk}] \quad , \quad (4.46)$$

onde $\tilde{C} = SCS^{-1}$.

Vamos avaliar a corrente de energia em decorrência da presença de *dephasing*. Note que temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle H \rangle &= \frac{d}{dt} Tr \{ H \rho \} \\ &= Tr \{ H \mathcal{D}_L(\rho) \} + Tr \{ H \mathcal{D}_R(\rho) \} + Tr \{ H \mathcal{D}^{deph}(\rho) \} \quad , \end{aligned} \quad (4.47)$$

onde

$$H = \sum_{knm} \epsilon_k S_{nk}^\dagger S_{km} \eta_n^\dagger \eta_m$$

Temos que:

$$\begin{aligned} \sum_i Tr \{ H D_i^{deph} \} &= \sum_{iknm} S_{nk}^\dagger S_{km} Tr \{ \epsilon_k \eta_n^\dagger \eta_m D_i^{deph} \} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{iknm} \epsilon_k S_{nk}^\dagger S_{km} [\delta_{im} + \delta_{in} - 2\delta_{in}\delta_{im}] \eta_n^\dagger \eta_m \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{ikn} \epsilon_k S_{nk}^\dagger S_{km} \eta_n^\dagger \eta_i - \frac{1}{2} \sum_{ikm} \epsilon_k S_{km} \eta_i^\dagger \eta_m + \sum_{ik} \epsilon_k S_{ik}^\dagger \eta_i^\dagger \eta_i \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{ikn} \epsilon_k S_{nk}^\dagger S_{ki} C_{in} - \frac{1}{2} \sum_{ikm} \epsilon_k S_{ik}^\dagger S_{km} C_{mi} + \sum_{ik} \epsilon_k S_{ik}^\dagger S_{ki} C_{ii} \quad , \end{aligned} \tag{4.48}$$

onde temos que $\epsilon_k = \tilde{H}_{kk}$ e $\tilde{H} = SHS^\dagger$.

$$\begin{aligned} \sum_i Tr \{ H D_i^{deph} \} &= \sum_{iknm} S_{nk}^\dagger S_{km} Tr \{ H_{kk} \eta_n^\dagger \eta_m D_i^{deph} \} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{ikn} H_{kk} S_{nk}^\dagger S_{km} \eta_n^\dagger \eta_i - \frac{1}{2} \sum_{ikm} H_{kk} S_{km} \eta_i^\dagger \eta_m + \sum_{ik} H_{kk} S_{ik}^\dagger \eta_i^\dagger \eta_i \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{in} H_{ni} C_{in} - \frac{1}{2} \sum_{im} H_{im} C_{mi} + \sum_{ik} H_{kk} C_{ii} \\ &= \sum_i H_{ii} C_{ii} - \sum_n (HC)_{nn} \end{aligned} \tag{4.49}$$

Concluimos que na presença de dephasing, temos um comportamento diferente para a corrente de energia:

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle = -\nabla \cdot \vec{J} + \sum_i H_{ii} C_{ii} - \sum_n (HC)_{nn} \quad . \tag{4.50}$$

Note que na presença de *dephasing*, a solução para a matriz de covariância é alterada e necessitamos calcular a influência do *dephasing* na evolução temporal. Através de (4.39) a (4.44) vemos que na presença de *dephasing* temos

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle \eta_n^\dagger \eta_m \rangle &= i \langle [\mathcal{H}, \eta_n^\dagger \eta_m] \rangle + Tr \{ \eta_n^\dagger \eta_m \mathcal{D}^L \} + Tr \{ \eta_n^\dagger \eta_m \mathcal{D}^R \} + \sum_i Tr \{ \eta_n^\dagger \eta_m D_i^{deph} \} . \\
 \frac{d}{dt} C_{mn} &= - (C \tilde{H}^\dagger)_{mn} - (\tilde{H} C)_{mn} - (S^{-1} S C S^{-1} \mathcal{M} S)_{mn} \\
 &\quad - (S^{-1} \mathcal{M} S C S^{-1} S)_{mn} + (S^{-1} \mathcal{B} S)_{mn} - \Gamma(1 - \delta_{nm}) C_{mn} \\
 \frac{d}{dt} C &= - (\tilde{H}^\dagger S \mathcal{M} S) C - C (\tilde{H}^\dagger + S \mathcal{M} S) + S^{-1} \mathcal{B} S \\
 \frac{d}{dt} C &= - [W C + C W^\dagger] + F - \Gamma \Delta(C) ,
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

onde, de acordo com (4.44), a operação $\Delta(C)$ remove a diagonal principal da matriz de covariância:

$$\Delta(C) = C - diag(C_{11}, C_{22}, \dots, C_{NN}) . \tag{4.52}$$

Para solucionar a matriz de covariância nessa nova situação, usaremos novamente o processo e vetorização. Note que a operação $\Delta(C)$ é linear, então existe uma matriz P correspondente a essa transformação:

$$Pvec(C) = vec[\Delta(C)] . \tag{4.53}$$

Esta matriz deleta os elementos de $vec(C)$ correspondentes aos elementos da diagonal de C :

$$P = diag(0, 1, 1, \dots, 1, 0, 1, 1, \dots, 1, 0) . \tag{4.54}$$

Aplicando o processo de vetorização, chegamos em:

$$(\mathcal{I} \otimes W) vec[C] + (W^* \otimes \mathcal{I}) vec[C] + \Gamma Pvec[C] = vec[F] \tag{4.55}$$

$$\{ (\mathcal{I} \otimes W) + (W^* \otimes \mathcal{I}) + \Gamma P \} vec[C] = vec[F] ,$$

que possui a forma de um sistema linear do tipo $Ax = B$.

```

solveNESS[ $\mathcal{H}$ ,  $\gamma$ , {TL_, TR_}] := Module[{L, ek, S, Sinv, glk, grk, M, B, W, F, vecW, vecRemoveDiag, vecF},
L=Length[ $\mathcal{H}$ ];
{ $\Lambda$ , S}=Quiet[Eigensystem[ $\mathcal{H}$ ]];
ek[j_]:=N[ $\Lambda$ [[j]]];
Sinv=Inverse[S];
glk[m_]:=Sinv[[1,m]]^2;
grk[m_]:=Sinv[[L,m]]^2;

M=Table[If[i==j, (1/2)*(glk[i]* $\chi$ Lk[TL,ek[i]]+grk[i]* $\chi$ Rk[TR,ek[i]]), 0], {i,1,L}, {j,1,L}];
B=Table[If[i==j, ( $\chi$ Lk[TL,ek[i]]*glk[i]*fLk[TL,ek[i]]+ $\chi$ Rk[TR,ek[i]]*grk[i]*fRk[TR,ek[i]]), 0], {i,1,L}, {j,1,L}];

W= I  $\mathcal{H}$ +Inverse[S].M.S;
F=Inverse[S].B.S;
vecW=kron[Conjugate[W],NEye[L]]+kron[NEye[L],W];
vecRemoveDiag=N[SparseArray[{i_, i_}/;Last[QuotientRemainder[i,L+1]]!=1->1, {L^2,L^2}]];
vecF=Table[Flatten[Transpose[F]][[i]], {i,1,L^2}];

Chop[unvectorization[LinearSolve[vecW+( $\gamma$ )*vecRemoveDiag,vecF]]
];
    
```

Figura 8 – Programa produzido para solucionar o sistema linear na presença de *dephasing*.

4.4 Análise de Sistemas Graduais (*Graded*)

Com as equações deduzidas na seção anterior, conseguimos fazer uma análise numérica na presença de *dephasing* na cadeia *XX* com reservatórios térmicos nas extremidades. O primeiro sistema a ser analisado será descrito por um Hamiltoniano *graded* da seguinte forma:

$$h_i = 1 + \left(\frac{i-1}{N-1}\right)N \quad \alpha_i = N - \left(\frac{i-1}{N-1}\right)N \quad , \quad (4.56)$$

ou seja, a interação entre os spins decresce linearmente do sítio 1 ao N e o campo magnético cresce do primeiro ao último spin. Para este sistema, analisamos a influência do *dephasing* em dois regimes: Na presença de campo magnético *graded* e na presença de campo uniforme.

Para obtermos o fenômeno de retificação, é fundamental que o sistema apresente assimetria na interação entre os spins. Assim que invertemos os banhos térmicos, vemos fluxos diferentes. Como discutimos na introdução, é possível construir dispositivos onde podemos tratar eficientemente a magnitude da corrente. Especificamente, se a simetria esquerda-direita for quebrada, a magnitude da corrente de spin, que é dada por $J(\Delta T)$ e induzida por um viés positivo, pode ser diferente em relação à magnitude de $J(-\Delta T)$. Deste modo, definimos o fator de retificação R como

$$R = \frac{J(\Delta T) + J(-\Delta T)}{J(\Delta T) - J(-\Delta T)} \quad , \quad (4.57)$$

onde para $\Delta T > 0$ temos $J(\Delta T) > 0$ (então $J(-\Delta T) < 0$).

Esta definição é importante para ver a eficiência da retificação. Para $R = 0$ significa que nenhuma retificação ocorre ($J(\Delta T) = J(-\Delta T)$), enquanto $|R| = 1$ significa que temos

retificação perfeita (ou seja, a corrente é finita em uma direção e nula na outra). Outros valores de R , positivo (negativo) indicam que o fluxo é maior para desvios de temperatura positivos (negativos).

Primeiramente, para entender o comportamento do *dephasing* na corrente de spin, estudaremos um cenário com um Hamiltoniano com interações constantes ao longo da cadeia. Para este sistema, com campo magnético fixo em $h_i = 2$ e interações dos spins fixas em $\alpha_i = 1$, encontramos o padrão para a corrente de spin descrito na figura 8. Note que quando o *dephasing* está presente, temos um pequeno aumento de corrente (menos de 1%) e o comportamento balístico, ou seja, o fluxo ser independente do tamanho da cadeia, é preservado.

Como veremos, a interação entre a estrutura *graded* do Hamiltoniano e a intensidade de *dephasing* surge um fenômeno não trivial: aumento na retificação da corrente de spin.

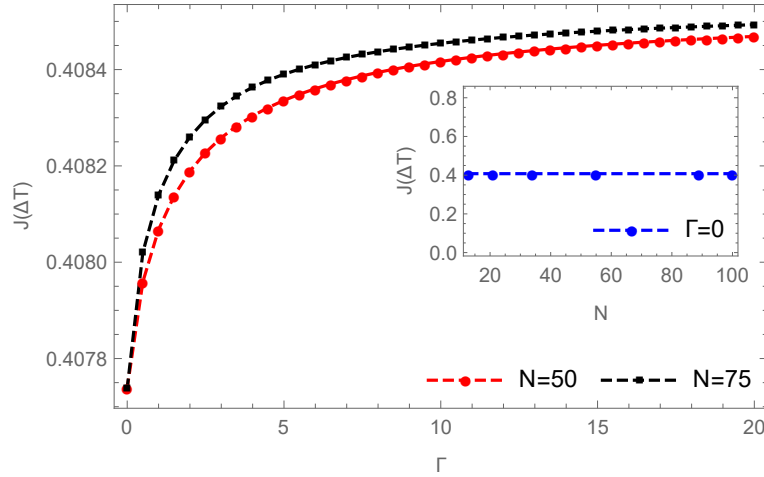


Figura 9 – Corrente de Spin em função da força de *dephasing* Γ para diferentes valores de N . O gradiente de temperatura é fixo em $\Delta T = 45$. Vemos que a corrente com $T_L > T_R$ tem um pequeno aumento (menos de 1%) mesmo em uma forte taxa de *dephasing*.

• Campo Magnético Uniforme

Na configuração de temperatura $T_L > T_R$ vemos que com o campo magnético uniforme, a presença de *dephasing* promoveu um aumento na intensidade da corrente e uma diminuição da corrente com os reservatórios invertidos

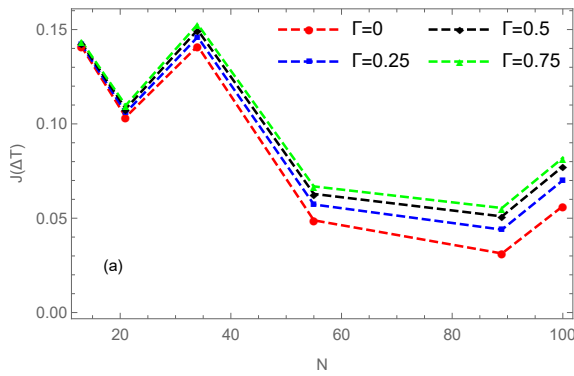


Figura 10 – Corrente de Spins para diferentes valores de *dephasing* com $\Delta T = 95$.

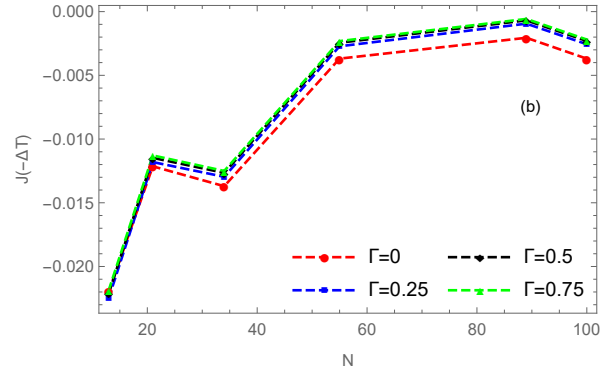


Figura 11 – Corrente inversa de Spins para diferentes valores de *dephasing* com $\Delta T = 95$.

Vemos que a corrente direta é aumentada e a corrente inversa é apagada quando aumentamos a taxa de *dephasing*.

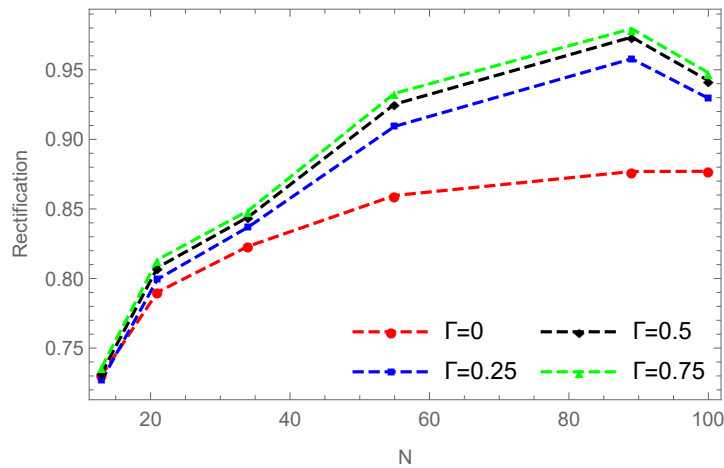


Figura 12 – Padrão de retificação para um sistema *graded* nas interações e homogêneo no campo magnético externo para diferentes valores de *dephasing*. O gradiente de temperatura é fixo em $\Delta T = 95$. Quando deixamos a taxa de *dephasing* assumir valores mais intensos, a retificação é potencializada.

Deste modo, usando a expressão para a retificação definida em (4.57), temos o padrão de retificação descrito na figura 12. Sabemos que o campo magnético externo é o fator predominante para mudanças na corrente de spin, logo para um sistema que possui um campo magnético mais intenso, ou seja, $h_i = 10$, encontramos o seguinte padrão para as correntes:

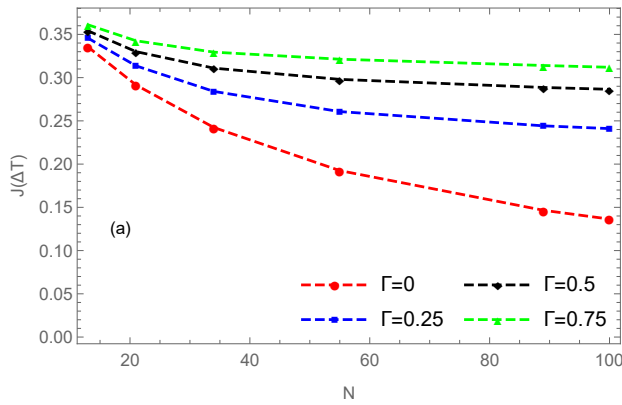


Figura 13 – Corrente de Spins para diferentes valores de *dephasing* com $\Delta T = 95$.

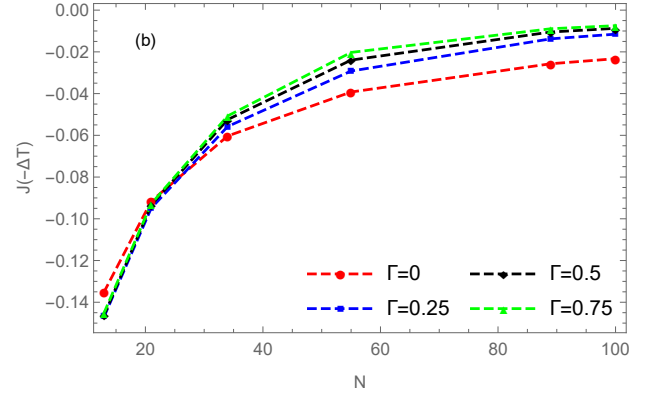


Figura 14 – Corrente inversa de Spins para diferentes valores de *dephasing* com $\Delta T = 95$.

Novamente vemos que, quando o *dephasing* está presente, a corrente é aumentada e a corrente inversa ($\Delta T < 0$) é apagada (Fig 14). Então obtemos um aumento na retificação assumindo um valor mais próximo de um quando o campo magnético é mais forte, Fig.15.

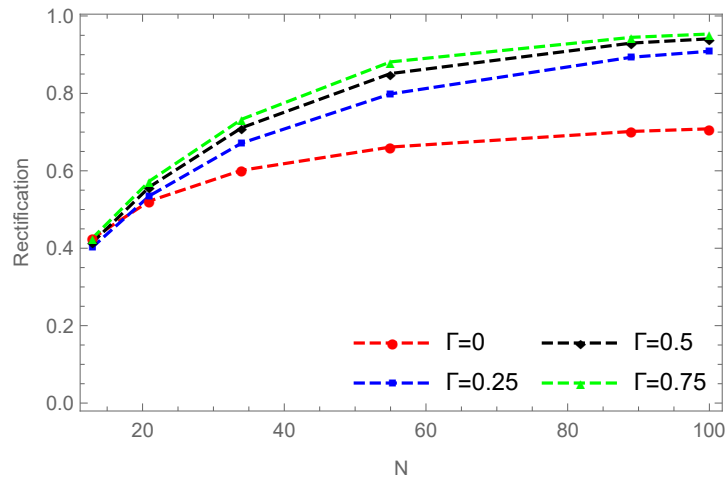


Figura 15 – Fator de retificação para um sistema com campo magnético intenso. O gradiente de temperatura é fixo em $\Delta T = 95$.

• Campo Magnético Graded

Agora vamos nos concentrar em um sistema totalmente graduado dado por

$$h_i = 1 + \left(\frac{i-1}{N-1} \right) N \quad \alpha_i = N - \left(\frac{i-1}{N-1} \right) N \quad , \quad (4.58)$$

ou seja, o Hamiltoniano é composto por um campo magnético *graded* crescendo linearmente do spin 1 até N , e com a interação de spin diminuindo linearmente do spin 1 para N . Nesta situação introduzimos mais assimetria no sistema, então a interação entre os Hamiltoniano e o termo de *dephasing* se tornam mais complexos de analisar, ou seja, com um sistema *graded* as correntes serão fortemente afetadas.

Usando a expressão para a corrente de spin na Eq.(4.36) encontramos o padrão representado nas Fig. 16 e 17. Vemos que quando o *dephasing* está presente, a corrente de spin inversa (quando o gradiente de temperatura é invertido) assume um valor positivo. Este fenômeno é dependente de três parâmetros: o tamanho da cadeia (N), a intensidade da taxa de *dephasing* (Γ) e o gradiente de temperatura (ΔT).

É interessante mencionar que o fenômeno *one-way* já foi observado em outros sistemas. Como exemplo, citamos o fenômeno de *one way* para a corrente de energia no modelo XXZ submetido a reservatórios de spin nas extremidades (*Boundary Driven*) [52].

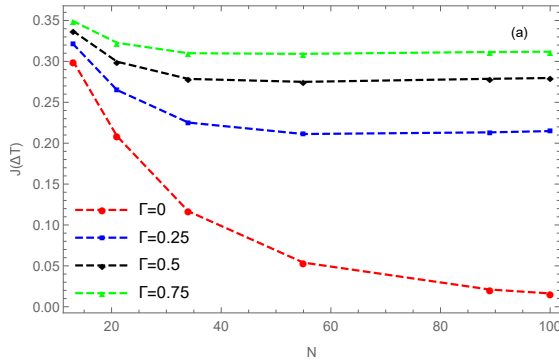


Figura 16 – Corrente de Spins para diferentes valores de *dephasing* com $\Delta T = 95$ e campo magnético *graded*.

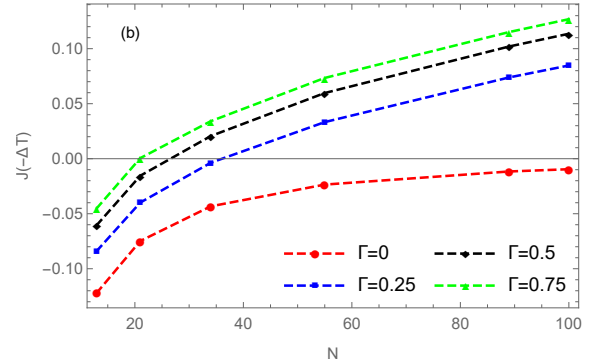


Figura 17 – Corrente de Spins Inversa para diferentes valores de *dephasing* com $\Delta T = 95$ e campo magnético *graded*.

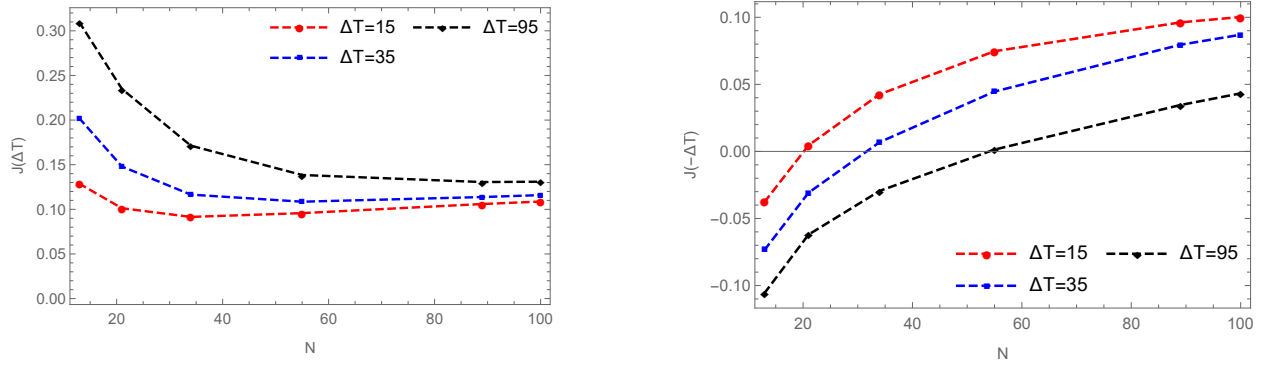


Figura 18 - Corrente de Spins com *dephasing* fixo para vários valores de ΔT e campo magnético *graded*.

- *Conclusão*

No presente capítulo, com o objetivo de compreender mecanismos para manipular e controlar correntes em sistemas quânticos, realizamos uma investigação em detalhes da corrente de spin na cadeia XX sujeito a interações *graded* e dissipadores globais. Quando o sistema é sujeito ao *dephasing*, mostramos a existência de um comportamento não trivial da corrente de spin, ou seja, mostramos a existência de mecanismo que aprimoram a retificação neste sistema e também como é possível controlar a corrente de spin através parâmetros da evolução microscópica que o sistema é sujeito (ΔT , N e Γ). Observamos também que é possível obter retificação perfeita usando materiais *graded* e escolha específica de parâmetros (Fig. 18). O presente trabalho foi publicado já se encontra disponível.

Non-trivial effect of dephasing: Enhancement of rectification of spin current in graded XX chains

Saulo H. S. Silva¹, Gabriel T. Landi², and Emmanuel Pereira^{1*}

¹*Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas,
Universidade Federal de Minas Gerais,*

30123-970, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil

²*Instituto de Física da Universidade de São Paulo,
05314-970 São Paulo, Brazil*

In order to reveal mechanisms to control and manipulate spin currents, we perform a detailed investigation of the dephasing effects in the open XX model with a Lindblad dynamics involving global dissipators and thermal baths. Specifically, we consider dephasing noise modelled by current preserving Lindblad dissipators acting on graded versions of these spin systems, that is, systems in which the magnetic field and/or the spin interaction are growing (decreasing) along the chain. In our analysis, we study the non-equilibrium steady-state via the covariance matrix using the Jordan-Wigner approach to compute the spin currents. We find that the interplay between dephasing and graded systems gives rise to a non trivial behavior: when we have homogeneous magnetic field and graded interactions we have rectification enhancement mechanisms, and when we have fully graded system we can control the spin current in order to keep the way direction of the particles/spin flow even with inverted baths. We describe our result in detailed numerical analysis and we see that rectification in this simple model indicates that the phenomenon may be of general occurrence in quantum spin systems.

PACS numbers: 05.70.Ln, 05.60.Gg, 75.10.Pq

Figura 18 – Paper publicado [64]: Phys. Rev. E 107, 054123 (2023) - Nontrivial effect of dephasing: Enhancement of rectification of spin current in graded XX chains

4.5 Análise de Potenciais Quase Periódicos

Nesta seção do capítulo, avaliaremos a cadeia XX na presença de potenciais quase-periódicos descritos pelos modelos de Aubry-André-Harper e Fibonacci. Nosso objetivo é avaliar como a corrente de energia e *spin* se comportam na presença de desordem, além de investigar o processo de retificação.

4.5.1 Aubry-André-Harper

É conhecido na literatura [65] que quando um Hamiltoniano do tipo *tightbinding* é sujeito a potenciais *on-site* fortemente desordenados, todos os auto-estados se tornam exponencialmente localizados, cujo fenômeno recebe nome *Anderson Localization* e como consequência, as propriedades de transporte mudam completamente.

O modelo de Aubry-André-Harper é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H_S = \sum_{j=1}^N V_j + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \alpha_j (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y) \quad (4.59)$$

onde

$$V_j = 2\lambda \cos(2\pi a j + \theta) \quad (4.60)$$

e a é uma constante, λ é a intensidade do potencial e θ é uma fase global arbitrária. É interessante comentar que este modelo pode ser implementado experimentalmente em átomos frios [66, 67].

Este potencial nos permite estudar transições de regime de transporte devido à existência do fator λ que rege a intensidade do potencial. Sabe-se que para $\lambda < 1$ todos os auto-estados são delocalizados e como consequência temos o regime de transporte balístico, isto é, o fluxo independe do tamanho da cadeia $J \propto N^0$. Já no caso $\lambda > 1$ temos auto-estados localizados em um centro específico, o que promove um decaimento exponencial em função do tamanho da cadeia.

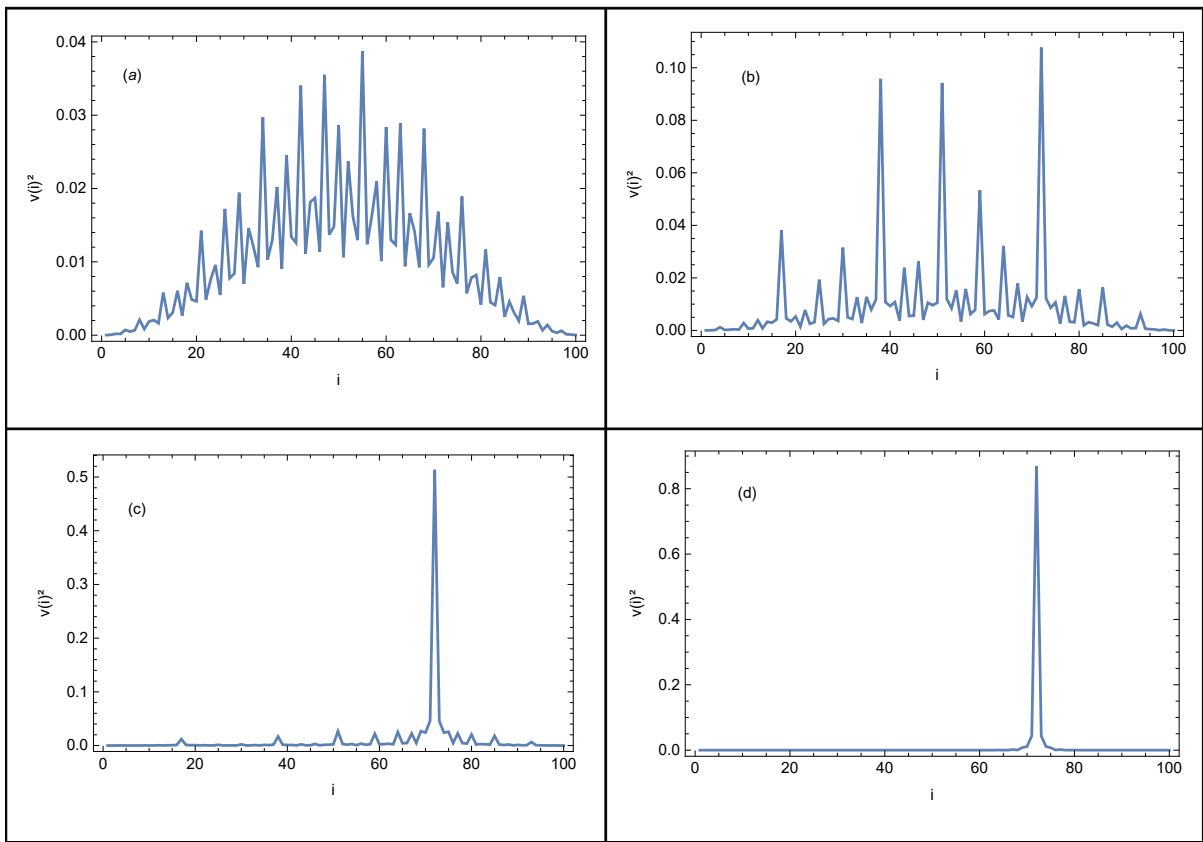


Figura 19 – $|v_i|^2$ em função de i . Nota-se que à medida que aumentamos a intensidade do potencial, o auto-estado se torna localizado: (a) $\lambda = 0.5$, (b) $\lambda = 0.9$, (c) $\lambda = 1.0$ e (d) $\lambda = 1.3$.

Tendo em vista os efeitos de assimetrias causados pelo parâmetro de desordem λ , a mudança no regime de transporte pode promover um efeito na retificação, logo investigaremos o comportamento da corrente de energia para este sistema quase-periódico com o objetivo de entender como este modelo pode ser capaz de atuar no controle e manipulação das correntes.

• **Corrente de Energia**

Para a corrente de energia na presença de potenciais quase periódicos, encontramos o seguinte padrão:

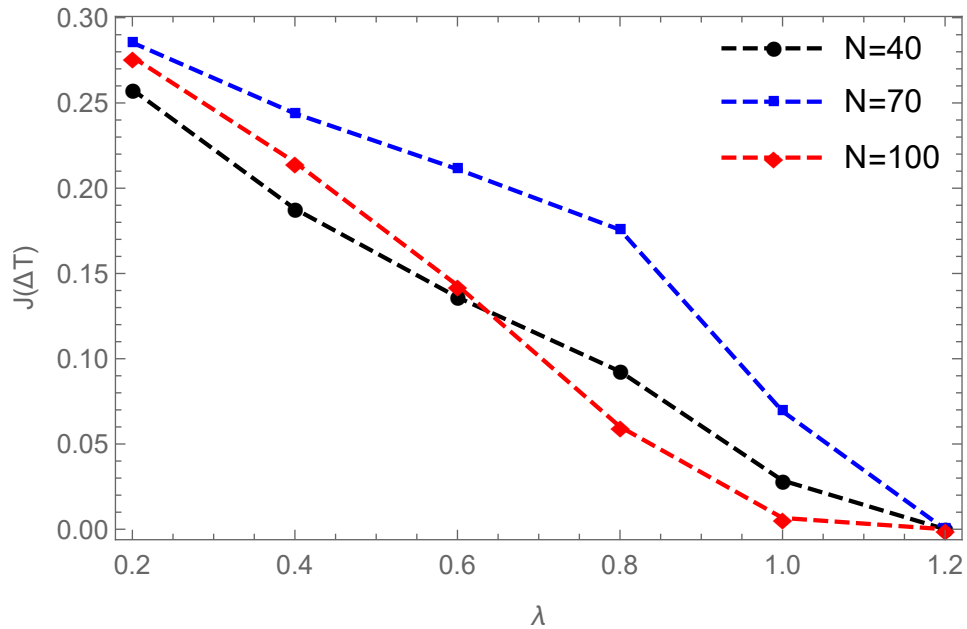


Figura 20 – Corrente de energia em função de λ para alguns valores de N . Nota-se que a corrente cai drasticamente à medida que aumenta a intensidade do potencial

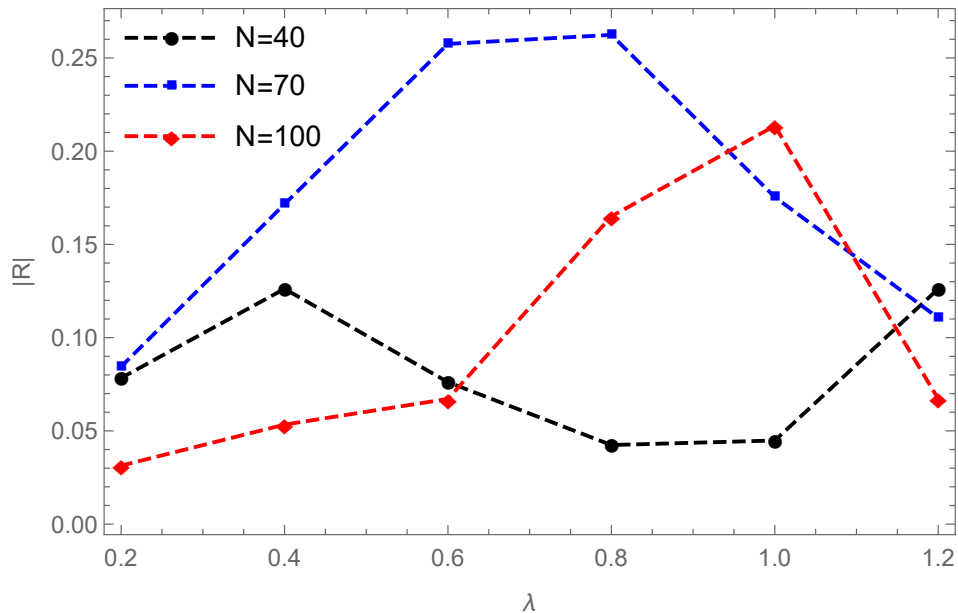


Figura 21 – Fator de retificação da corrente de energia (4.57) em função de λ para alguns valores de N . Nota-se que assume valores mais intensos ($\approx 25\%$ de retificação) para valores de λ entre 0.6 e 0.9.

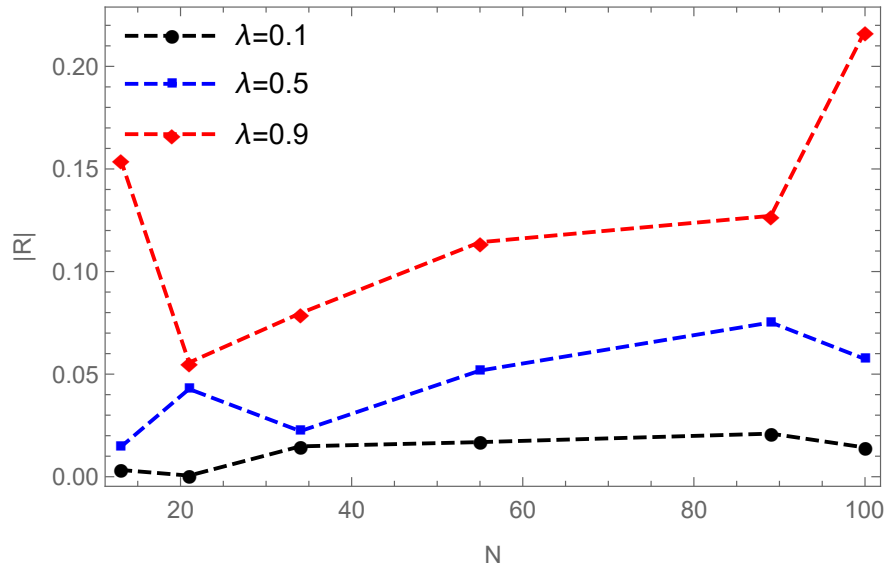


Figura 22 – Fator de retificação da corrente de energia (4.57) em função de N para alguns valores de λ . Nota-se que quando aumentamos λ o fator de retificação aumenta.

- **Corrente de Spin/Partículas**

Pelo modelo Global derivado, sabemos que a corrente de *spin*/partículas é sensível à mudança do campo magnético, ou seja, com a mudança do potencial quase periódico ela sofrerá mais alterações, em comparação com a corrente de energia (cujo fator de mudança está associado mais intensamente aos reservatórios nas extremidades). Para essa corrente, é possível estudar, juntamente com os potenciais quase periódico, a presença de *dephasing* em conjunto com a equação (4.46).

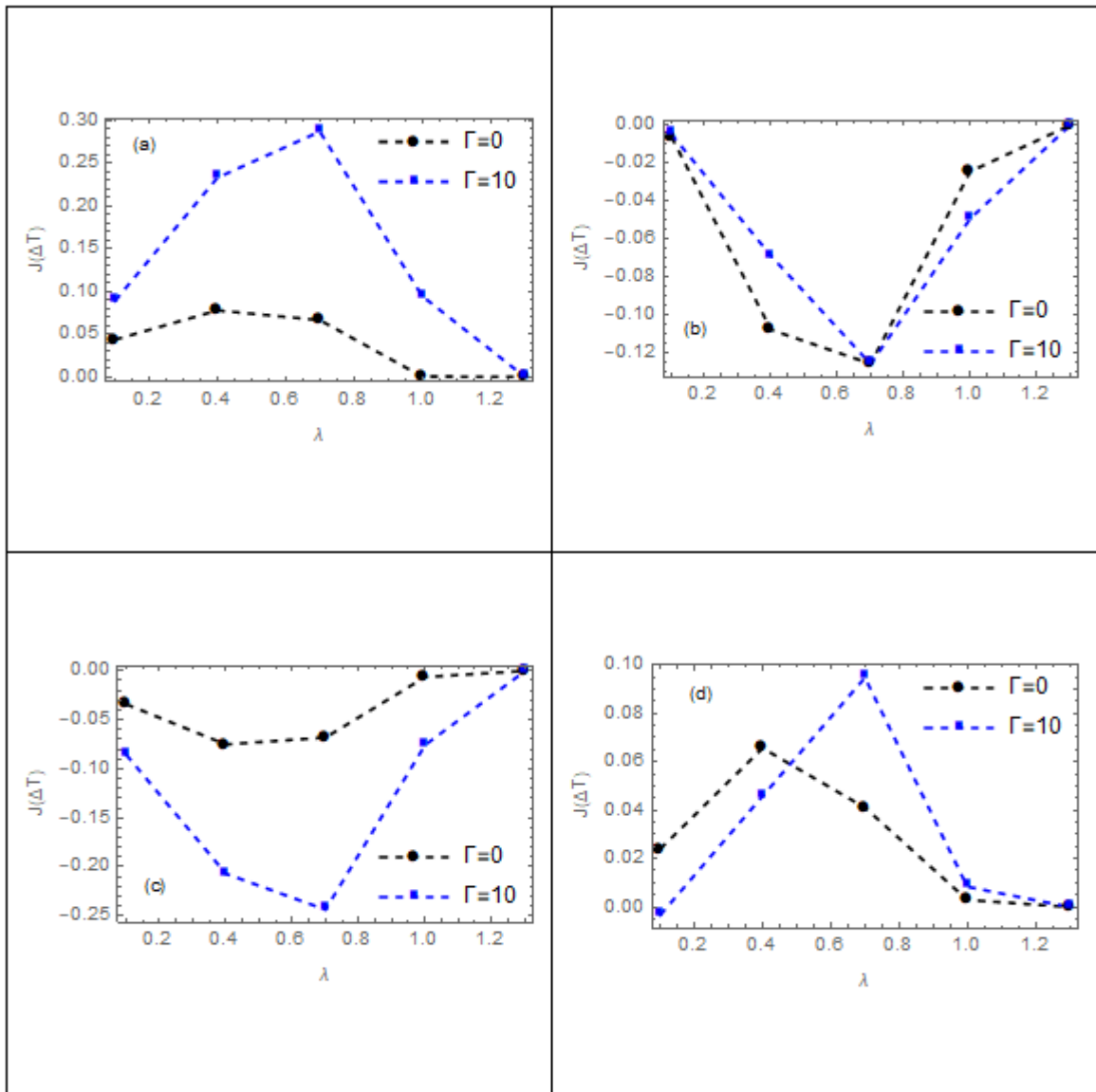


Figura 23 – Corrente de Partículas na presença de *dephasing* para $\Delta T = 95$. Na figura (a), temos $N = 55$, na figura (b) temos $N = 75$, na figura (c) temos $N = 85$ e na figura (d) temos $N = 100$.

Nota-se que a presença de *dephasing* promove um aumento da corrente para diferentes valores de λ . Quanto maior o tamanho da cadeia, mais desordenada fica a distribuição do potencial *on-site*, de tal modo que a intensidade da corrente diminui com o tamanho da cadeia.

4.5.2 Potencial de Fibonacci

Estudaremos agora o segundo potencial quase-periódico abordado na literatura. Este modelo é construído através de uma sequência específica, conhecida como *Fibonacci Word*. Sejam $S_1 = \lambda_1$ e $S_2 = \lambda_1\lambda_2$ duas palavras para compor uma *Fibonacci Word*, temos

$$\begin{aligned}
 S_{n+1} &= S_n + S_{n-1}, \quad n > 2 \\
 S_1 &= \lambda_1 \\
 S_2 &= \lambda_1\lambda_2 \\
 S_3 &= \lambda_1\lambda_2\lambda_1 \\
 S_4 &= \lambda_1\lambda_2\lambda_1\lambda_1\lambda_2.
 \end{aligned} \tag{4.61}$$

Estudaremos nesta parte da Tese dois modelos descritos pela *Fibonacci Word*, onde no primeiro caso teremos $\lambda_1 = \lambda$ e $\lambda_2 = 0$ e no segundo caso teremos $\lambda_1 = \lambda$ e $\lambda_2 = -\lambda$. Para a geração destes Hamiltonianos, utilizamos o programa descrito abaixo:

```

Hfib[L_,λ_]:=Module[{V,i},
  V[n_]:=IntegerPart[(n+1)GoldenRatio^-2]-IntegerPart[nGoldenRatio^-2];
  SparseArray[{{i_,i_}→λ V[i],{i_,j_}/;j=i+1→1,{i_,j_}/;j=i-1→1},{L,L]}];
    
```

```

Hfib2[L_,λ_]:=Module[{V,i},
  V[n_]:=If[(IntegerPart[(n+1)GoldenRatio^-2]-IntegerPart[nGoldenRatio^-2])=1,λ,-λ];
  SparseArray[{{i_,i_}→ V[i],{i_,j_}/;j=i+1→1,{i_,j_}/;j=i-1→1},{L,L]}];
    
```

Figura 24 – Programa desenvolvido para construção do Hamiltoniano no modelo de Fibonacci.

- ***Fibonacci Word*** $\lambda_1 = \lambda$ e $\lambda_2 = 0$

Para esta primeira situação, apesar da desordem descrita pelo potencial *on site*, o seu valor não altera de sinal no decorrer da cadeia.

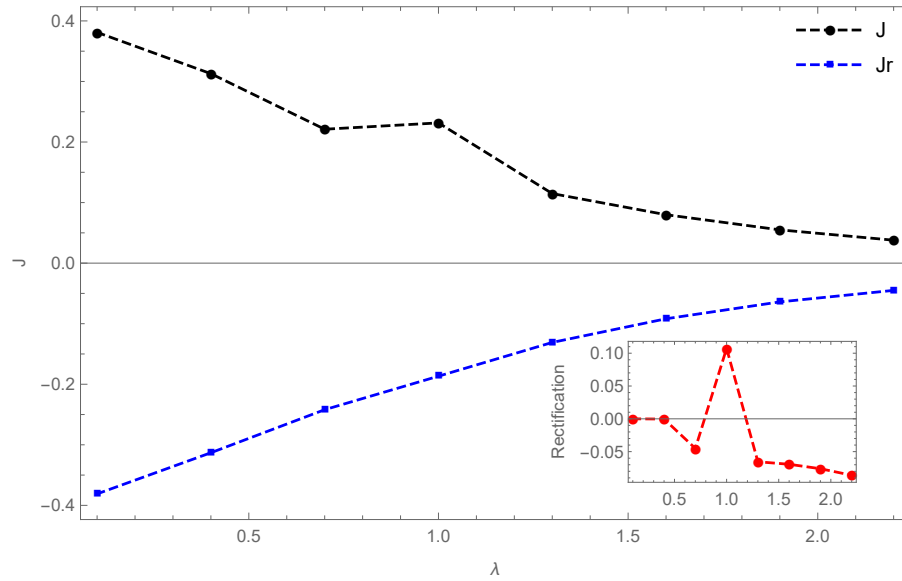


Figura 25 – Corrente de energia para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$ e tamanho da cadeia dado por $N = 55$.

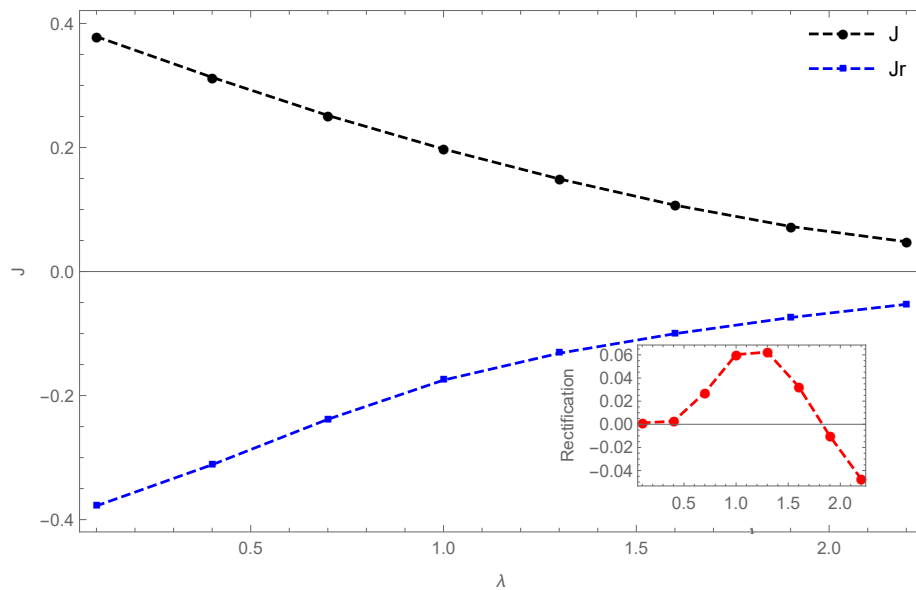


Figura 26 – Corrente de energia para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$ e tamanho da cadeia dado por $N = 75$.

Observamos que com o aumento de λ a corrente de energia se aproxima de zero, comportamento que é independente do tamanho da cadeia (Fig. 25 a Fig.27). O fator de retificação da corrente de energia aumentou à medida que aumentamos o tamanho do sistema, em contrapartida ele foi mais intenso na região de menores valores de correntes, ou seja, quanto maior o parâmetro de desordem λ , menor a intensidade das correntes e maior o fator de retificação. Avaliaremos agora a corrente de partículas na presença *dephasing*.

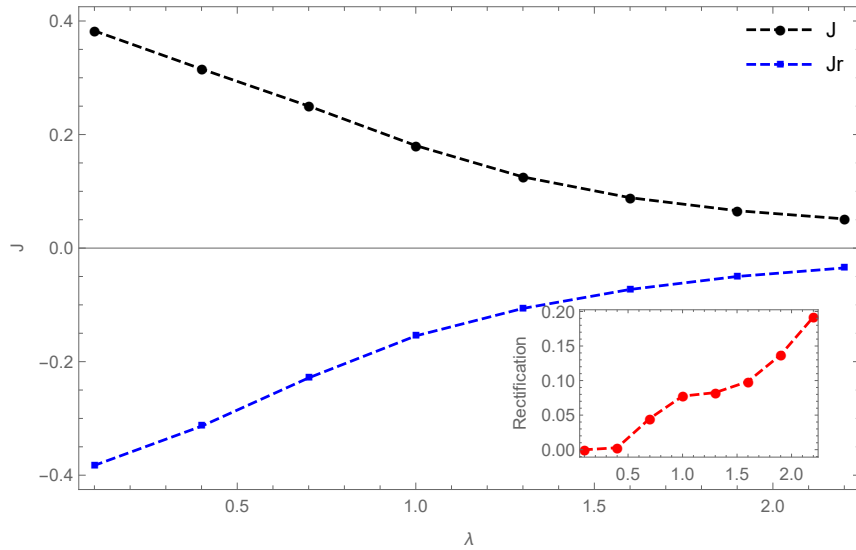


Figura 27 – Corrente de energia para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$ e tamanho da cadeia dado por $N = 100$.

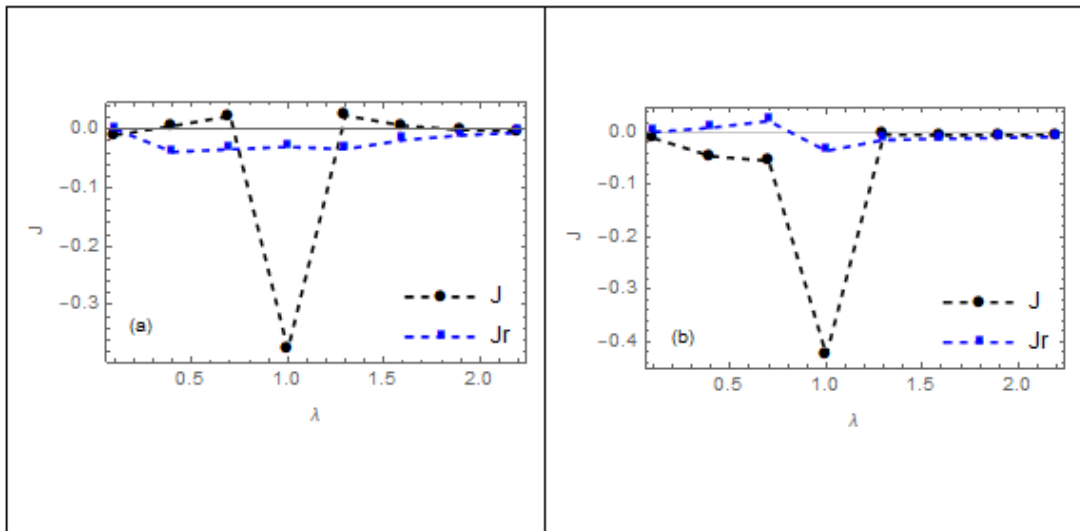


Figura 28 – Corrente de Partículas para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$ e tamanho da cadeia dado por $N = 55$. A figura (a) representa o modelo sem *dephasing* e a figura (b) com *dephasing* fixado em $\Gamma = 10$.

Através da Fig.28, vemos que a presença de *dephasing* promove uma alteração no sentido da corrente, onde para certos valores de λ temos uma mudança de sinal. Este efeito é dependente do tamanho da cadeia, a qual caracterizará uma maior ou menor desordem. Para $N = 75$ temos o padrão descrito pela figura 29 pela qual vemos, novamente, que a presença de *dephasing* promoveu um aumento da intensidade da corrente na primeira configuração ($J(\Delta T)$) e uma diminuição de intensidade para a segunda configuração ($J(-\Delta T)$), além de mudar o seu sentido para $\lambda < 1.2$. Note que para este modelo microscópico, o *dephasing* promoveu um aumento no fator de retificação para $\lambda > 1.2$, visto que diminuiu significativamente a corrente de partículas com os banhos invertidos.

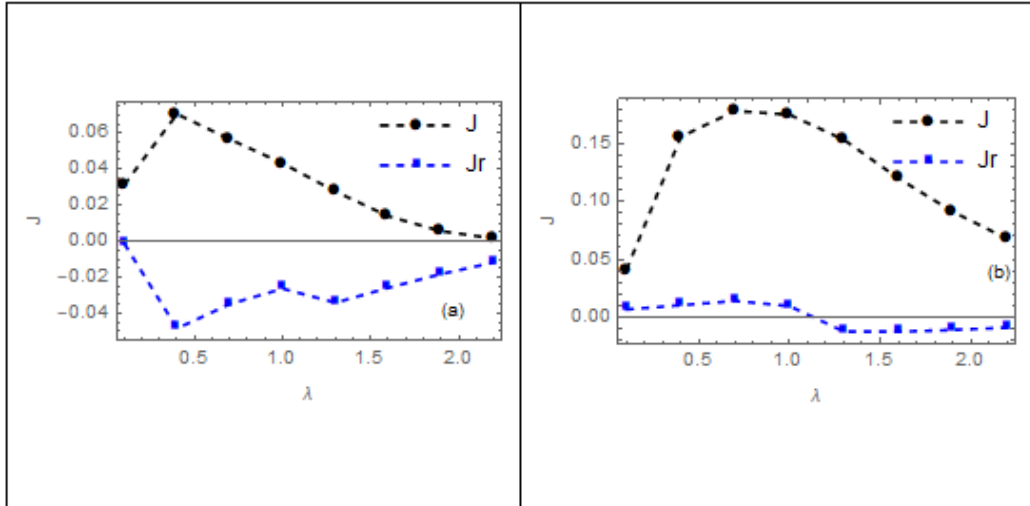


Figura 29 – Corrente de Partículas para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$ e tamanho da cadeia dado por $N = 75$. A figura (a) representa o modelo sem *dephasing* e a figura (b) com *dephasing* fixo em $\Gamma = 10$.

- **Fibonacci** $\lambda_1 = \lambda$ e $\lambda_2 = -\lambda$

Analisaremos agora a segunda situação no modelo de Fibonacci onde a cadeia possui mais assimetria, em comparação ao modelo estudado anteriormente, a qual será representada por uma mudança no sinal do potencial *on-site*. Nesta nova situação, investigaremos a atuação do campo magnético nas correntes de energia e *spin* de tal modo que possa aprimorar o efeito de retificação. Primeiramente, para a corrente de energia, encontramos o padrão de corrente descrito na figura abaixo utilizando as expressões (4.46) e (4.57)

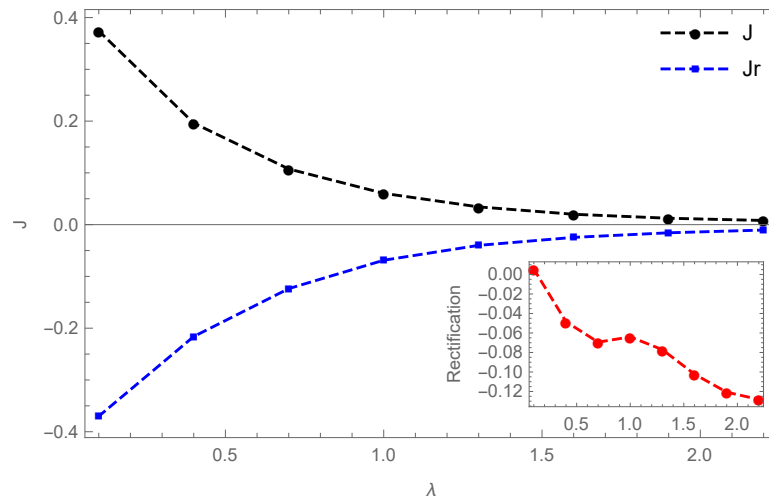


Figura 30 – Corrente de energia para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$ e tamanho da cadeia dado por $N = 55$.

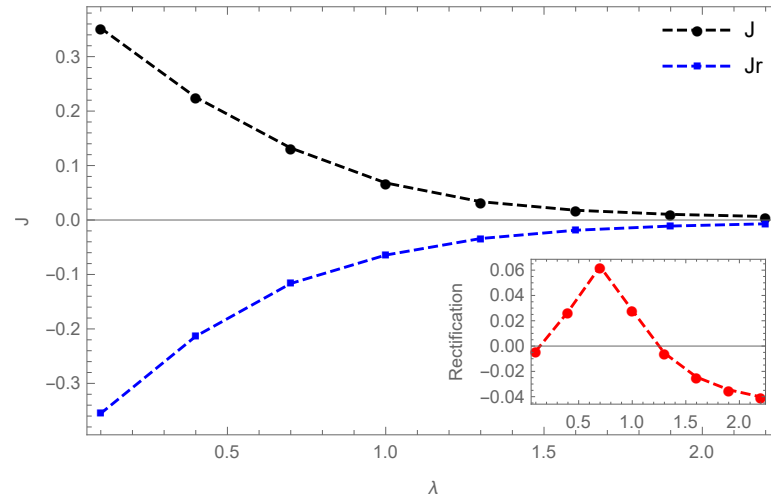


Figura 31 – Corrente de energia para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$ e tamanho da cadeia dado por $N = 75$.

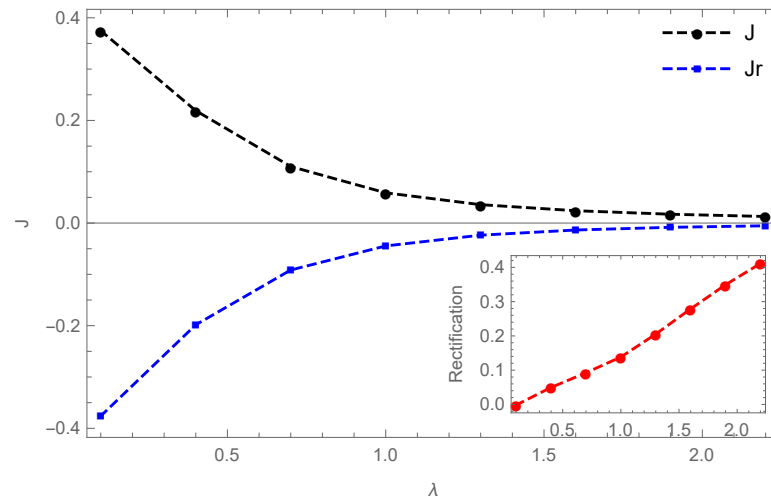


Figura 32 – Corrente de energia para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$ e tamanho da cadeia dado por $N = 100$.

Avaliaremos agora a corrente de partículas na presença deste potencial e também com *dephasing*. Nesta situação a assimetria e o *dephasing* mostraram não ser favoráveis, em certas configurações, ao processo de retificação, a qual diminuiu à medida que aumentamos a intensidade do *dephasing* (Fig. 33 e 34). À medida que aumentamos o tamanho da cadeia, a assimetria em função de N exerce um controle sobre a corrente de partículas, fato mostrado na figura 34 onde vemos uma mudança drástica no padrão de retificação.

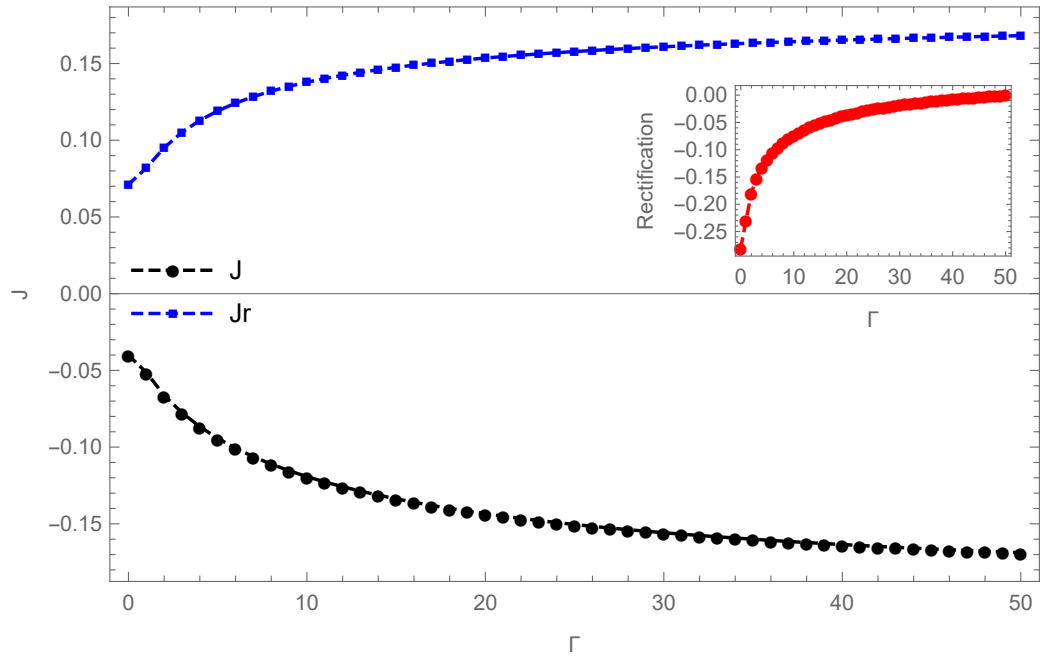


Figura 33 – Corrente de partículas para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$, $\lambda = 0.6$ e tamanho da cadeia dado por $N = 55$ em função da intensidade de *dephasing*.

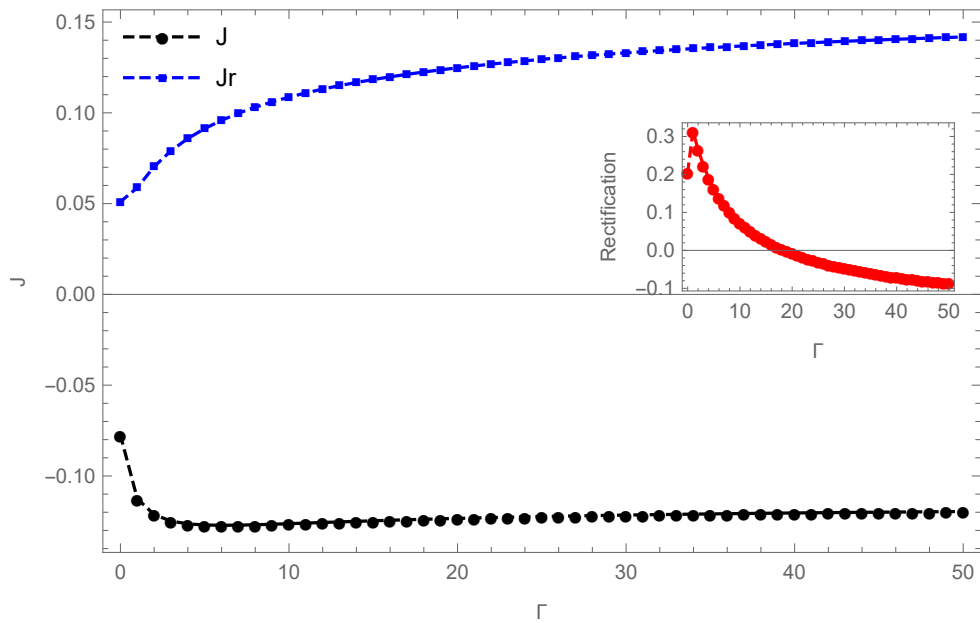


Figura 34 – Corrente de partículas para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$, $\lambda = 0.6$ e tamanho da cadeia dado por $N = 80$.

Ao aumentarmos o valor de λ as correntes tendem a se anular, em contrapartida com o aumento da desordem o *dephasing* promove um aumento da retificação, em comparação com o sistema submetido a um menor valor de λ . Este fato é visto nas figuras 36 e 37 da próxima página.

Através das figuras 36 e 37, vemos que o comportamento da retificação foi inverso

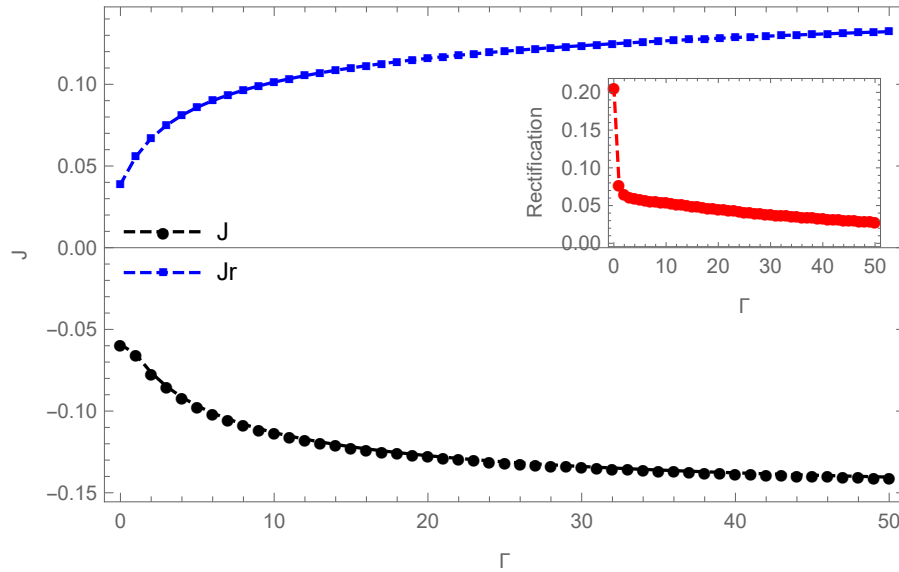


Figura 35 – Corrente de partículas para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$, $\lambda = 0.6$ e tamanho da cadeia dado por $N = 95$.

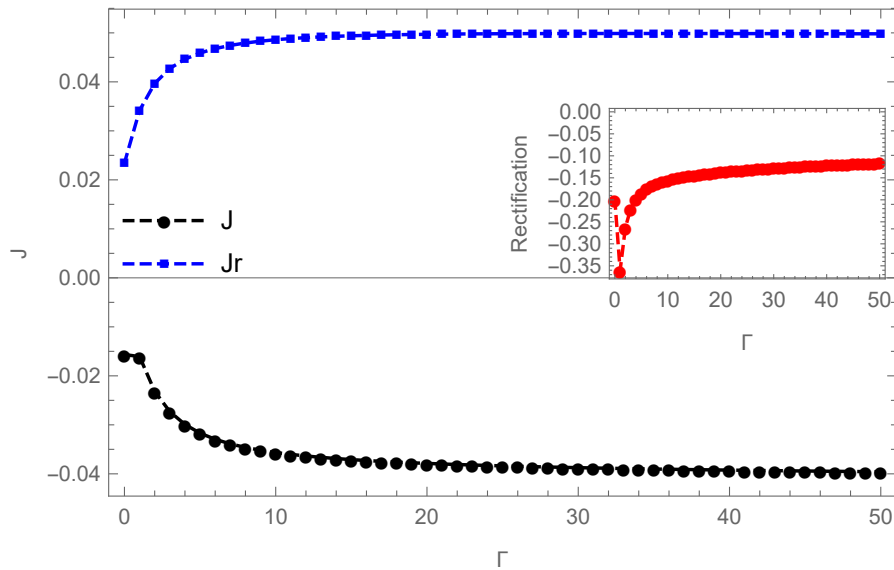


Figura 36 – Corrente de partículas para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$, $\lambda = 1.2$ e tamanho da cadeia dado por $N = 55$.

ao aumentarmos o tamanho do sistema, ou seja, para $N = 55$ a retificação assumiu um máximo ($R = -0.35$) com uma taxa de *dephasing* pequena e se estabilizou para um valor de retificação próximo de $R = -0.15$. Quando aumentamos o tamanho do sistema para $N = 80$ o comportamento foi inverso, ou seja, a corrente inversa dada por $\Delta T > 0$ assumiu uma maior intensidade, mas mantendo o mesmo valor de retificação em comparação com o sistema em $N = 55$. Note que mesmo para uma situação onde aumenta o valor de N e intensa desordem, o fenômeno de retificação não desapareceu, logo ele é persistente em regimes de alta assimetria, fato que é visto nas figuras 39 a 41.

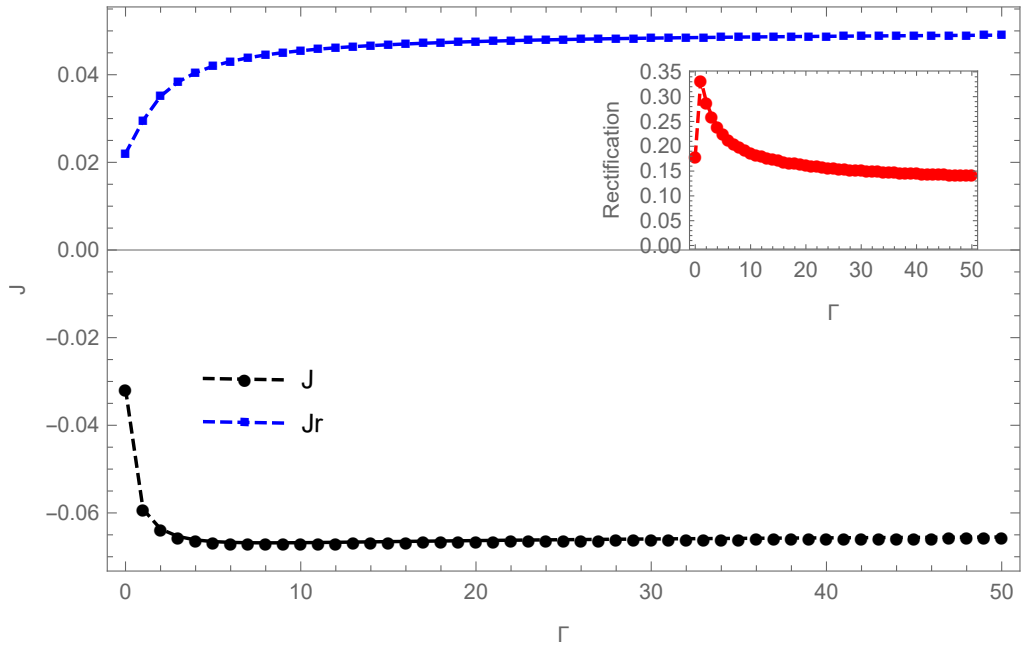


Figura 37 – Corrente de partículas para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$, $\lambda = 1.2$ e tamanho da cadeia dado por $N = 80$.

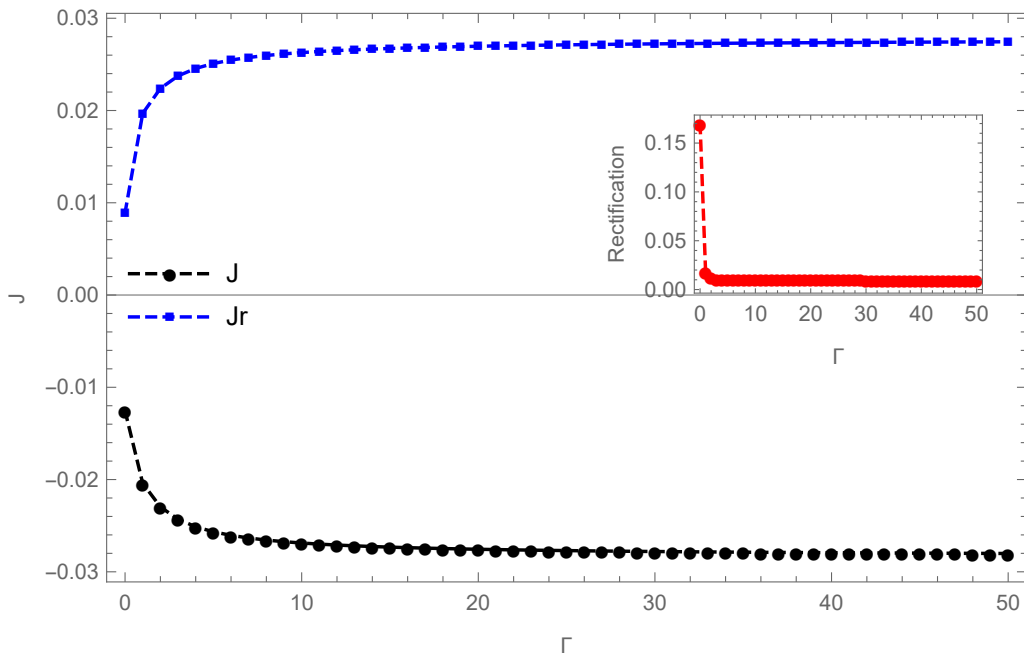


Figura 38 – Corrente de partículas para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$, $\lambda = 1.2$ e tamanho da cadeia dado por $N = 95$.

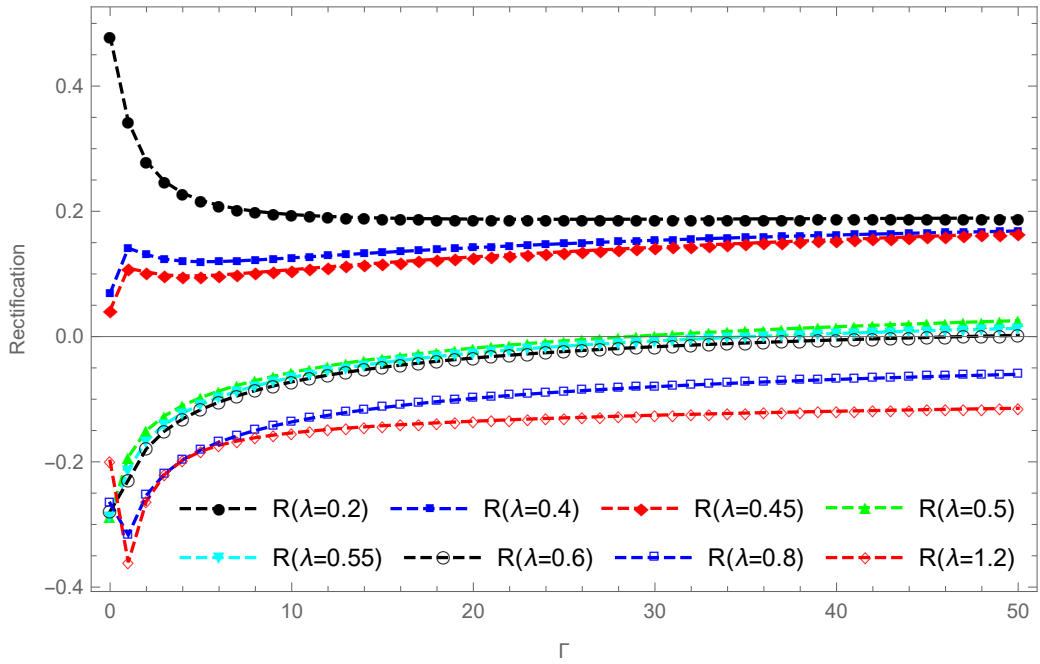


Figura 39 – Retificação da Corrente de partículas para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$ e tamanho da cadeia dado por $N = 55$. Este gráfico mostra um *gap* de retificação em uma transição de λ , de tal modo que para $\lambda > 0.5$ temos a corrente dada por $\Delta T < 0$ sendo mais intensa em relação à corrente com $\Delta T > 0$.

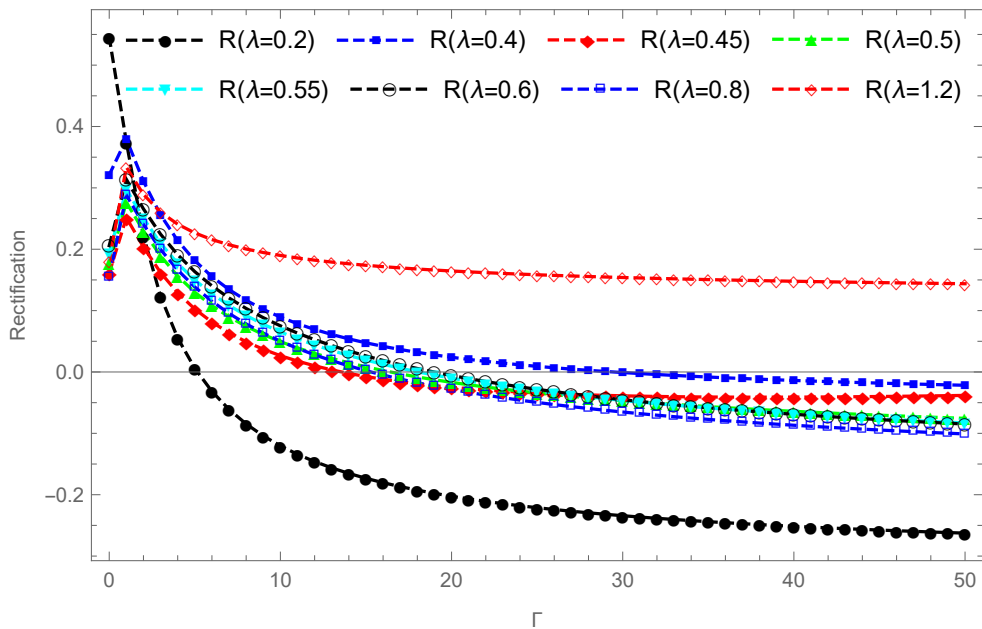


Figura 40 – Retificação da Corrente de partículas para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$ e tamanho da cadeia dado por $N = 80$. Este gráfico mostra que existe uma transição entre a corrente ser mais intensa à medida que aumenta o valor da desordem, ou seja, quanto maior o parâmetro λ a corrente dada por $\Delta T < 0$ fica mais intensa.

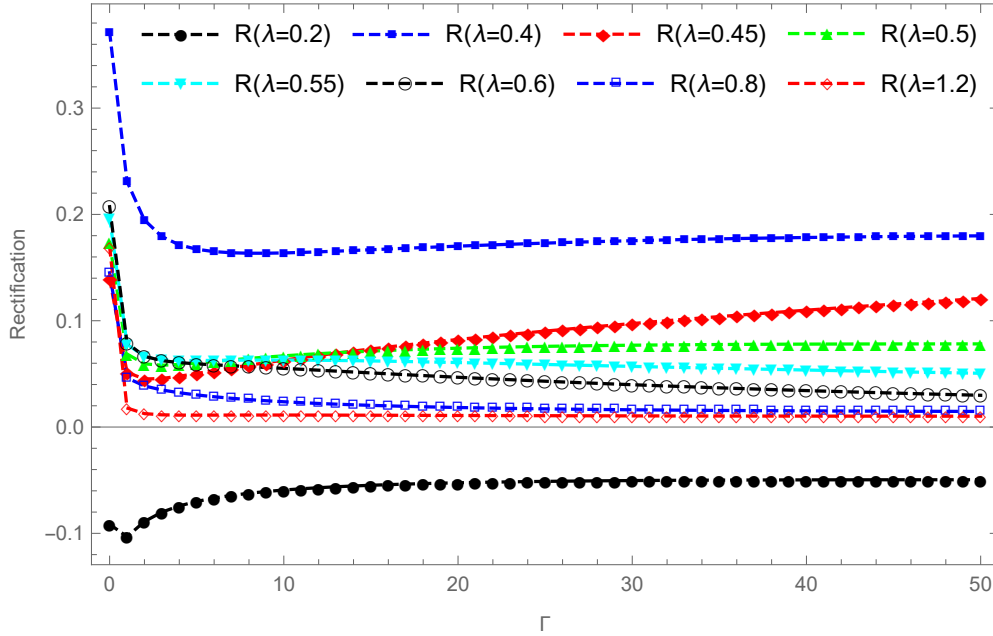


Figura 41 – Retificação da Corrente de partículas para o modelo de Fibonacci com $\Delta T = 95$ e tamanho da cadeia dado por $N = 95$. Gráfico para vários valores de λ , o qual mostra que a retificação, neste valor de N , tende a ficar próxima de zero, mas não sendo zero, para valor alto de desordem.

- **Conclusão**

Sumarizando, nesta presente parte do capítulo, investigamos a corrente de *spin* e energia na presença de potenciais quase periódicos, pela qual vemos que o fator de desordem λ promove mudanças drásticas no regime de transporte. No modelo de Aubry-André-Harper observamos que a corrente de energia assumiu um máximo de retificação em 25%, mostrado na figura 21, fato que não se mostra monótono em relação ao valor de N . Analisando a corrente de partículas/*spin*, notamos que esta corrente é sensível à mudança do tamanho do sistema, promovendo uma alteração no sentido do fluxo, fato que é visto na figura 23. Na presença de *dephasing* a corrente de partículas/*spin* sofreu um aprimoramento e à medida que aumenta o tamanho do sistema, temos uma diminuição na intensidade da corrente. Nota-se para este modelo que a existência de retificação se mantém mesmo para uma situação de alta desordem.

Estudando o potencial de Fibonacci, vemos que este sistema fornece um maior controle sobre as correntes, fato que é observado nas figuras 25 a 36. Para a corrente de energia, observamos que na primeira situação dada por $\lambda_1 = \lambda$ e $\lambda_2 = 0$, ou seja, apenas um sinal no potencial *on-site* o fator de retificação para a corrente de energia assumiu um valor máximo em aproximadamente $R = 0.1$, já na segunda situação onde $\lambda_1 = \lambda$ e $\lambda_2 = -\lambda$, promovendo uma maior assimetria, o fator de retificação só foi maior no modelo composto de 100 *spins* assumindo um valor de $R = -0.4$, mas em regimes de

baixa intensidade de corrente (Fig. 33). Analisando a corrente de partículas/*spin*, vemos que na primeira situação ($\lambda_1 = \lambda$ e $\lambda_2 = 0$) nota-se um aumento da corrente na presença de *dephasing* e também um controle de sentido, mostrado na figura 29. Para a segunda situação ($\lambda_1 = \lambda$ e $\lambda_2 = -\lambda$) a maior assimetria promoveu um efeito retificador no sistema e foi possível encontrar efeitos diferentes, ou seja, para baixas intensidade de *dephasing* temos uma maior intensidade no fator de retificação (Fig. 33 e 34) e quando aumentamos o parâmetro de desordem temos um fator de retificação simétrico para dois tamanhos de sistema (Fig. 36 e 37). Através das figuras 39 a 41, vemos um efeito interessante: o fenômeno de retificação não é suprimido mesmo na presença de alta desordem e alta taxa de *dephasing*. Tendo em vista os resultados adquiridos no estudo de potenciais quase periódicos, estamos realizando um processo de refinamento dos dados e em breve será publicado.

5 Conclusão e Perspectivas Futuras

A descrição e manipulação da transferência de energia em escala quântica é um problema de importância fundamental e tecnológica, recebendo crescente atenção nos últimos anos contendo aplicações em litografia, possibilidade de manipular pequenos sistemas quânticos, as propriedades dos átomos frios, a possibilidade de diferentes regimes de transporte em matéria condensada, a possibilidade de retificadores, etc. Visando este grande avanço, com ênfase nas tecnologias destinadas à Spintrônica e a Fonônica, nesta Tese de doutorado do programa de pós-graduação em Física da UFMG, realizamos um estudo detalhado das propriedades termodinâmicas de sistemas quânticos abertos.

Estudamos a derivação da equação de Lindblad através de dois modelos microscópicos levando a propriedades termodinâmicas diferentes. O modelo *Boundary Driven*, desenvolvido no capítulo 3, mostrou a vasta propriedade termodinâmica de sistemas sujeitos ao protocolo de interações repetidas (R.I.P) com um estudo detalhado da cadeia de Ising submetida a dois reservatórios diferentes. Mostramos a distinção da corrente de energia em correntes de calor e trabalho, contrastando resultados anteriores que previam violação das leis termodinâmicas [43]. Verificou-se que modelos de Ising acoplados através de suas fronteiras a reservatórios de spin possuem correntes de calor e trabalho nulas, mas quando acoplados a reservatórios térmicos possuem correntes de calor e trabalho diferentes de zero e uma corrente nula de energia. Deste modo, mostramos que ao realizar um estudo utilizando apenas a equação de Lindblad não nos fornece toda informação termodinâmica presente no sistema.

Nos capítulos seguintes estudamos a derivação da equação de Lindblad via *weak coupling limit* com o objetivo de abordar um modelo eficiente para estudo da retificação térmica. Derivamos um modelo analítico para a cadeia XX em contato com reservatórios térmicos nas suas extremidades e, através das transformações de Jordan-Wigner, foi possível obter expressões para as correntes de partículas/spin e para a corrente de energia do sistema, além de outras propriedades do estado estacionário de não equilíbrio. Essa cadeia mostrou ser um excelente modelo para retificação térmica, com fator de retificação não nulo no limite termodinâmico para um Hamiltoniano de interação com pequena assimetria nos campos magnéticos externos. Aprofundamos a abordagem na cadeia XX por um estudo via matriz de covariância com o qual foi possível estudar o sistema na presença de *dephasing*. Nesta situação, abordamos dois sistemas diferentes com o objetivo de estudar sistemas retificadores, com os quais vimos que a presença de sistemas *graded* e *dephasing* promove um controle da corrente de *spin* além de aprimorar o efeito de retificação da corrente. Para o modelo com potenciais quase-periódicos foi encontrado que o potencial de Fibonacci se mostrou um bom modelo para controle da corrente de energia e *spin*,

em comparação com o potencial de Aubry-André-Harper. Notou-se que o fenômeno de retificação é persistente nestes dois modelos de sistemas quase periódicos mesmo para sistemas grandes e com alta desordem.

Para uma perspectiva futura, tendo em vista interações de muitos corpos no contexto quântico, pretendemos avançar na investigação destes sistemas e compreender como as suas características podem intensificar o efeito de retificação térmica. Dentre outras possibilidades, vamos considerar fenômenos de transição de fases (de diferentes ordens) e seu papel em um processo de retificação térmica, situação ainda pouco abordada na literatura. Em uma outra direção, há alguns estudos recentes envolvendo o papel do emaranhamento [30] em cadeias de spins com poucos corpos, que mostram como este fenômeno não-clássico pode contribuir para a retificação térmica, aumentando-a em várias ordens de magnitude. Visando o procedimento analítico desenvolvido na presença de *dephasing*, pretendemos expandir a abordagem para outras cadeias de *spin* em conjunto com propriedades quânticas como emaranhamento e correlações não clássicas, além de implementar outros tipos de reservatórios para o estudo dos fluxos no sistema.

Referências

- [1] Callen, Herbert B: *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics; 2nd ed.* Wiley, New York, NY, 1985. <https://cds.cern.ch/record/450289>. Citado na página 9.
- [2] Sklar, Lawrence: *Philosophy of Physics*. Westview Press, 1992. Citado na página 9.
- [3] Oliveira, Cesar de e Thiago Werlang: *Ergodic hypothesis in classical statistical mechanics*. Revista Brasileira de Ensino de Física, 29:189–201, abril 2007. Citado na página 9.
- [4] Singh, Navinder: *How and why does statistical mechanics work*. 2011. Citado na página 9.
- [5] Landau, L.D. e E.M. Lifshitz: *Statistical Physics: Volume 5*. Número v. 5. Elsevier Science, 2013, ISBN 9780080570464. <https://books.google.com.br/books?id=VzgJN-XPTRsC>. Citado na página 9.
- [6] Vinjanampathy, Sai e Janet Anders: *Quantum thermodynamics*. Contemporary Physics, 57(4):545–579, jul 2016. <https://doi.org/10.10802F00107514.2016.1201896>. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 11.
- [7] Myers, Nathan M., Obinna Abah e Sebastian Deffner: *Quantum thermodynamic devices: From theoretical proposals to experimental reality*. AVS Quantum Science, 4(2):027101, jun 2022. <https://doi.org/10.11162F5.0083192>. Citado na página 9.
- [8] Endres, Manuel, Hannes Bernien, Alexander Keesling, Harry Levine, Eric R. Anschuetz, Alexandre Krajenbrink, Crystal Senko, Vladan Vuletic, Markus Greiner e Mikhail D. Lukin: *Atom-by-atom assembly of defect-free one-dimensional cold atom arrays*. Science, 354(6315):1024–1027, nov 2016. <https://doi.org/10.11262Fscience.aah3752>. Citado na página 9.
- [9] Pereira, Emmanuel: *Thermal rectification in quantum graded mass systems*. Physics Letters A, 374(19-20):1933–1937, apr 2010. <https://doi.org/10.10162Fj.physleta.2010.02.071>. Citado na página 9.
- [10] Pereira, Emmanuel: *Perfect thermal rectification in a many-body quantum Ising model*. Physical Review E, 99(3), mar 2019. <https://doi.org/10.11032Fphysreve.99.032116>. Citado 8 vezes nas páginas 9, 11, 22, 24, 26, 30, 37 e 43.

- [11] Werlang, T., M. A. Marchiori, M. F. Cornelio e D. Valente: *Optimal rectification in the ultrastrong coupling regime*. Physical Review E, 89(6), jun 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.89.062109>. Citado 8 vezes nas páginas 9, 11, 22, 24, 25, 30, 37 e 43.
- [12] Bonetto, F., J. L. Lebowitz e L. Rey-Bellet: *FOURIER'S LAW: A CHALLENGE TO THEORISTS*. Em *Mathematical Physics 2000*, páginas 128–150. Published by Imperial College Press and Distributed by World Scientific Publishing CO., May 2000. https://doi.org/10.1142/TF9781848160224_0008. Citado na página 10.
- [13] Chang, C. W., D. Okawa, A. Majumdar e A. Zettl: *Solid-State Thermal Rectifier*. Science, 314(5802):1121–1124, nov 2006. <https://doi.org/10.1126/Science.1132898>. Citado na página 10.
- [14] Li, Baowen, Lei Wang e Giulio Casati: *Thermal Diode: Rectification of Heat Flux*. Physical Review Letters, 93(18), oct 2004. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.184301>. Citado na página 10.
- [15] Balachandran, Vinitha, Stephen R. Clark, John Goold e Dario Poletti: *Energy Current Rectification and Mobility Edges*. Physical Review Letters, 123(2), jul 2019. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.020603>. Citado na página 10.
- [16] Chiaracane, Cecilia, Mark T. Mitchison, Archak Purkayastha, Géraldine Haack e John Goold: *Quasiperiodic quantum heat engines with a mobility edge*. Physical Review Research, 2(1), jan 2020. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.013093>. Citado na página 10.
- [17] Pereira, Emmanuel: *Thermal rectification in classical and quantum systems: Searching for efficient thermal diodes*. EPL (Europhysics Letters), 126(1):14001, may 2019. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/126/14001>. Citado na página 10.
- [18] Starr, Chauncey: *The Copper Oxide Rectifier*. Physics, 7(1):15–19, janeiro 1936. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 42.
- [19] Paula, Alberto L de, Emmanuel Pereira, Raphael C Drumond e M C O Aguiar: *Energy current manipulation and reversal of rectification in graded XXZ spin chains*. Journal of Physics: Condensed Matter, 32(17):175403, jan 2020. <https://doi.org/10.1088/1361-648x/32/17/175403>. Citado na página 10.
- [20] Wang, Jiao, Emmanuel Pereira e Giulio Casati: *Thermal rectification in graded materials*. Physical Review E, 86(1), jul 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.86.010101>. Citado na página 10.

- [21] Rieder, Z., J. L. Lebowitz e E. Lieb: *Properties of a Harmonic Crystal in a Stationary Nonequilibrium State*. Em *Statistical Mechanics*, páginas 373–378. Springer Berlin Heidelberg, 1967. https://doi.org/10.1007%2F978-3-662-10018-9_21. Citado na página 10.
- [22] Purkayastha, Archak, Sambuddha Sanyal, Abhishek Dhar e Manas Kulkarni: *Anomalous transport in the Aubry-André-Harper model in isolated and open systems*. *Physical Review B*, 97(17), may 2018. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.97.174206>. Citado na página 10.
- [23] Varma, Vipin Kerala, Clélia de Mulatier e Marko Žnidarič: *Fractality in nonequilibrium steady states of quasiperiodic systems*. *Physical Review E*, 96(3), sep 2017. <https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.96.032130>. Citado na página 10.
- [24] Neto, Antônio Francisco, Humberto C. F. Lemos e Emmanuel Pereira: *Heat conduction in quantum harmonic chains with alternate masses and self-consistent thermal reservoirs*. *Physical Review E*, 76(3), sep 2007. <https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.76.031116>. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 11.
- [25] Pekola, Jukka P. e Bayan Karimi: *iColloquium/i : Quantum heat transport in condensed matter systems*. *Reviews of Modern Physics*, 93(4), oct 2021. <https://doi.org/10.1103%2Frevmodphys.93.041001>. Citado na página 10.
- [26] Batalhão, Tiago B., Alexandre M. Souza, Laura Mazzola, Ruben Auccaise, Roberto S. Sarthour, Ivan S. Oliveira, John Goold, Gabriele De Chiara, Mauro Paternostro e Roberto M. Serra: *Experimental Reconstruction of Work Distribution and Study of Fluctuation Relations in a Closed Quantum System*. *Physical Review Letters*, 113(14), oct 2014. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevlett.113.140601>. Citado na página 11.
- [27] Herrera, Marcela, John P. S. Peterson, Roberto M. Serra e Irene D’Amico: *Easy Access to Energy Fluctuations in Nonequilibrium Quantum Many-Body Systems*. *Physical Review Letters*, 127(3), jul 2021. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevlett.127.030602>. Citado na página 11.
- [28] Breuer, H. P. e F. Petruccione: *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press, Great Clarendon Street, 2002. Citado 3 vezes nas páginas 11, 15 e 37.
- [29] Tesser, Ludovico, Bibek Bhandari, Paolo Andrea Erdman, Elisabetta Paladino, Rosario Fazio e Fabio Taddei: *Heat rectification through single and coupled quantum dots*. *New Journal of Physics*, 24(3):035001, mar 2022. <https://doi.org/10.1088%2F1367-2630%2Fac53b8>. Citado na página 11.

- [30] Poulsen, Kasper, Alan C. Santos, Lasse B. Kristensen e Nikolaj T. Zinner: *Entanglement-enhanced quantum rectification*. *Physical Review A*, 105(5), may 2022. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.105.052605>. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 108.
- [31] Bloch, Immanuel, Jean Dalibard e Sylvain Nascimbène: *Quantum simulations with ultracold quantum gases*. *Nature Physics*, 8(4):267–276, apr 2012. <https://doi.org/10.1038/Nphys2259>. Citado na página 11.
- [32] Blatt, Rainer: *Quantum Simulations with Trapped Ions*. Em *International Conference on Quantum Information*. OSA, 2011. <https://doi.org/10.1364/Ficqi.2011.qwb1>. Citado na página 11.
- [33] Duan, L. M., E. Demler e M. D. Lukin: *Controlling Spin Exchange Interactions of Ultracold Atoms in Optical Lattices*. *Physical Review Letters*, 91(9), aug 2003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.090402>. Citado na página 11.
- [34] Whitlock, Shannon, Alexander W Glaetzle e Peter Hannaford: *Simulating quantum spin models using Rydberg-excited atomic ensembles in magnetic microtrap arrays*. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 50(7):074001, mar 2017. <https://doi.org/10.1088/1361-6455/50/7/074001>. Citado na página 11.
- [35] Nguyen, T. L., J. M. Raimond, C. Sayrin, R. Cortiñas, T. Cantat-Moltrecht, F. Assemat, I. Dotsenko, S. Gleyzes, S. Haroche, G. Roux, Th. Jolicoeur e M. Brune: *Towards Quantum Simulation with Circular Rydberg Atoms*. *Physical Review X*, 8(1), feb 2018. <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.8.011032>. Citado na página 11.
- [36] Barra, Felipe: *The thermodynamic cost of driving quantum systems by their boundaries*. *Scientific Reports*, 5(1), oct 2015. <https://doi.org/10.1038/srep14873>. Citado 6 vezes nas páginas 11, 18, 19, 21, 41 e 43.
- [37] Rodrigues, Franklin L. S., Gabriele De Chiara, Mauro Paternostro e Gabriel T. Landi: *Thermodynamics of Weakly Coherent Collisional Models*. *Physical Review Letters*, 123(14), oct 2019. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.140601>. Citado na página 11.
- [38] González, J. Onam, Luis A. Correa, Giorgio Nocerino, José P. Palao, Daniel Alonso e Gerardo Adesso: *Testing the Validity of the ‘Local’ and ‘Global’ GKLS Master Equations on an Exactly Solvable Model*. *Open Systems & Information Dynamics*, 24(04):1740010, dec 2017. <https://doi.org/10.1142/S1230161217400108>. Citado na página 15.
- [39] Chiara, Gabriele De, Gabriel Landi, Adam Hewgill, Brendan Reid, Alessandro Ferraro, Augusto J Roncaglia e Mauro Antezza: *Reconciliation of quantum local master*

- equations with thermodynamics*. New Journal of Physics, 20(11):113024, nov 2018. <https://doi.org/10.1088%2F1367-2630%2Faaecee>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 21.
- [40] Prosen, Tomaž: *Open XXZ Spin Chain: Nonequilibrium Steady State and a Strict Bound on Ballistic Transport*. Physical Review Letters, 106(21), may 2011. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevlett.106.217206>. Citado na página 15.
- [41] Strasberg, Philipp, Gernot Schaller, Tobias Brandes e Massimiliano Esposito: *Quantum and Information Thermodynamics: A Unifying Framework Based on Repeated Interactions*. Physical Review X, 7(2), apr 2017. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevx.7.021003>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 19.
- [42] Pereira, Emmanuel: *Heat, work, and energy currents in the boundary-driven XXZ spin chain*. Physical Review E, 97(2), feb 2018. <https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.97.022115>. Citado 3 vezes nas páginas 15, 19 e 21.
- [43] Levy, Amikam e Ronnie Kosloff: *The local approach to quantum transport may violate the second law of thermodynamics*. EPL (Europhysics Letters), 107(2):20004, jul 2014. <https://doi.org/10.1209%2F0295-5075%2F107%2F20004>. Citado 4 vezes nas páginas 16, 21, 32 e 107.
- [44] Prosen, Tomaž: *Matrix product solutions of boundary driven quantum chains*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 48(37):373001, aug 2015. <https://doi.org/10.1088%2F1751-8113%2F48%2F37%2F373001>. Citado na página 21.
- [45] Calabrese, Pasquale e John Cardy: *Evolution of entanglement entropy in one-dimensional systems*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2005(04):P04010, apr 2005. <https://doi.org/10.1088%2F1742-5468%2F2005%2F04%2Fp04010>. Citado na página 22.
- [46] Landi, Gabriel T., E. Novais, Mário J. de Oliveira e Dragi Karevski: *Flux rectification in the quantum XXZ chain*. Physical Review E, 90(4), oct 2014. <https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.90.042142>. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 64.
- [47] Spohn, Herbert e Joel L. Lebowitz: *Irreversible Thermodynamics for Quantum Systems Weakly Coupled to Thermal Reservoirs*. Em *Advances in Chemical Physics*, páginas 109–142. John Wiley & Sons, Inc., mar 2007. <https://doi.org/10.1002%2F9780470142578.ch2>. Citado na página 37.
- [48] Pereira, Emmanuel e Ricardo R. Ávila: *Increasing thermal rectification: Effects of long-range interactions*. Physical Review E, 88(3), sep 2013. <https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.88.032139>. Citado na página 42.

- [49] Pereira, Emmanuel e Humberto C.F. Lemos: *Energy transport in boundary driven quantum spin systems: One-way street phenomenon in models with long range interactions*. Physics Letters A, 384(34):126864, dec 2020. <https://doi.org/10.1016%2Fj.physleta.2020.126864>. Citado na página 42.
- [50] Pereira, Emmanuel, Humberto C. F. Lemos e Ricardo R. Ávila: *Ingredients of thermal rectification: The case of classical and quantum self-consistent harmonic chains of oscillators*. Physical Review E, 84(6), dec 2011. <https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.84.061135>. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 64.
- [51] Pereira, Emmanuel: *Sufficient conditions for thermal rectification in general graded materials*. Physical Review E, 83(3), mar 2011. <https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.83.031106>. Citado na página 43.
- [52] Pereira, Emmanuel: *Rectification and one-way street for the energy current in boundary-driven asymmetric quantum spin chains*. Physical Review E, 95(3), mar 2017. <https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.95.030104>. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 89.
- [53] Lacerda, Artur M., John Goold e Gabriel T. Landi: *Dephasing enhanced transport in boundary-driven quasiperiodic chains*. Physical Review B, 104(17), nov 2021. <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.104.174203>. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 72.
- [54] Yoshizawa, H., G. Shirane, H. Shiba e K. Hirakawa: *Neutron scattering study of a one-dimensional XY antiferromagnet Cs₂CoCl₄*. Phys. Rev. B, 28:3904–3908, Oct 1983. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.28.3904>. Citado na página 43.
- [55] Levkovich-Maslyuk, Fedor: *The Bethe ansatz*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 49(32):323004, jul 2016. <https://doi.org/10.10882F1751-81132F492F322F323004>. Citado na página 43.
- [56] Lieb, Elliott, Theodore Schultz e Daniel Mattis: *Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain*. Em *Condensed Matter Physics and Exactly Soluble Models*, páginas 543–601. Springer Berlin Heidelberg, 2004. https://doi.org/10.1007%2F978-3-662-06390-3_35. Citado na página 44.
- [57] Schultz, T. D., D. C. Mattis e E. H. Lieb: *Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions*. Reviews of Modern Physics, 36(3):856–871, jul 1964. <https://doi.org/10.1103%2Frevmodphys.36.856>. Citado na página 44.

- [58] Willms, Allan R.: *Analytic Results for the Eigenvalues of Certain Tridiagonal Matrices*. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 30(2):639–656, jan 2008. <https://doi.org/10.1137/2F070695411>. Citado 2 vezes nas páginas 65 e 150.
- [59] Silva, Saulo H. S., Gabriel T. Landi, Raphael C. Drumond e Emmanuel Pereira: *Heat rectification on the XX chain*. Phys. Rev. E, 102:062146, Dec 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.102.062146>. Citado na página 71.
- [60] Žnidarič, Marko: *Exact solution for a diffusive nonequilibrium steady state of an open quantum chain*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2010(05):L05002, may 2010. <https://doi.org/10.1088/2F1742-5468/2F2010/2F05/2F105002>. Citado na página 72.
- [61] Asadian, A., D. Manzano, M. Tiersch e H. J. Briegel: *Heat transport through lattices of quantum harmonic oscillators in arbitrary dimensions*. Physical Review E, 87(1), jan 2013. <https://doi.org/10.1103/2Fphysreve.87.012109>. Citado na página 72.
- [62] Mendoza-Arenas, J J, S Al-Assam, S R Clark e D Jaksch: *Heat transport in the $X/iX/iZ$ spin chain: from ballistic to diffusive regimes and dephasing enhancement*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2013(07):P07007, jul 2013. <https://doi.org/10.1088/2F1742-5468/2F2013/2F07/2Fp07007>. Citado na página 72.
- [63] Bartels, R. H. e G. W. Stewart: *Solution of the matrix equation $AX - XB = C$ [F4]*. Communications of the ACM, 15(9):820–826, sep 1972. <https://doi.org/10.1145/2F361573.361582>. Citado na página 79.
- [64] Silva, Saulo H. S., Gabriel T. Landi e Emmanuel Pereira: *Nontrivial effect of dephasing: Enhancement of rectification of spin current in graded XX chains*. Phys. Rev. E, 107:054123, May 2023. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.107.054123>. Citado na página 91.
- [65] Aubry, Serge e Gilles André: *Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices*. Proceedings, VIII International Colloquium on Group-Theoretical Methods in Physics, 3, janeiro 1980. Citado na página 91.
- [66] Lye, J. E., L. Fallani, C. Fort, V. Guarrera, M. Modugno, D. S. Wiersma e M. Inguscio: *Effect of interactions on the localization of a Bose-Einstein condensate in a quasiperiodic lattice*. Physical Review A, 75(6), jun 2007. <https://doi.org/10.1103/physreva.75.061603>. Citado na página 92.

-
- [67] Roth, Robert e Keith Burnett: *Phase diagram of bosonic atoms in two-color superlattices*. Physical Review A, 68(2), aug 2003. <https://doi.org/10.1103/physreva.68.023604>. Citado na página 92.

Apêndices

APÊNDICE A – Procedimentos analíticos para o Modelo de Ising

Estudaremos neste apêndice os procedimentos analíticos do modelo de Ising submetido ao banho de spins e ao banho de bósons. Primeiramente para o banho de spins, vimos que a interação entre o sistema e o reservatório é dada por:

$$v_{L(R)} = \gamma_{L(R)}(\sigma_{1(N)}^x \sigma_{L(R)}^x + \sigma_{1(N)}^y \sigma_{L(R)}^y) \quad , \quad (\text{A.1})$$

cujo dissipador é obtido através da expressão geral (2.13):

$$\mathcal{D}_L(\rho) = X_L^+ \left[\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - \frac{1}{2} \{ \sigma_1^- \sigma_1^+, \rho \} \right] + X_L^- \left[\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_1^+ \sigma_1^-, \rho \} \right] \quad (\text{A.2})$$

$$\mathcal{D}_R(\rho) = X_R^+ \left[\sigma_N^+ \rho \sigma_N^- - \frac{1}{2} \{ \sigma_N^- \sigma_N^+, \rho \} \right] + X_R^- \left[\sigma_N^- \rho \sigma_N^+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_N^+ \sigma_N^-, \rho \} \right] \quad , \quad (\text{A.3})$$

onde $\rho \equiv \rho_S$, $X_{L(R)}^+ = 2\gamma_{L(R)}(1 + f_{L(R)})$ e $X_{L(R)}^- = 2\gamma_{L(R)}(1 - f_{L(R)})$.

O procedimento analítico consiste em solucionar a equação de Lindblad e calcular o estado estacionário de não equilíbrio *NESS*. Como foi mostrado no capítulo 2, vamos supor que este estado é diagonal na base dos autoestados do Hamiltoniano de Ising

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |--\rangle \\ |2\rangle &= |-\rangle \\ |3\rangle &= |+\rangle \\ |4\rangle &= |++\rangle \quad , \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

logo devemos solucionar:

$$\begin{aligned} 0 &= [\mathcal{D}_L(\rho) + \mathcal{D}_R(\rho)]_{i,i} \\ 0 &= \langle i | [\mathcal{D}_L(\rho) + \mathcal{D}_R(\rho)] | i \rangle \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Primeiramente calcularemos para o spin acoplado ao banho da esquerda, ou seja $\mathcal{D}_L(\rho)$. Aplicando as propriedades dos operadores de spin,

$$\begin{aligned} \sigma^+ |+\rangle &= 0 \\ \sigma^+ |-\rangle &= |+\rangle \\ \sigma^- |+\rangle &= |-\rangle \\ \sigma^- |-\rangle &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

em conjunto com (A.2) e (A.5) obtemos os conjuntos de equações:

$$\begin{aligned}
 \langle 1 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 1 \rangle &= 0 \\
 \langle 2 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 2 \rangle &= 0 \\
 \langle 3 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 3 \rangle &= \rho_{11} \\
 \langle 4 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 4 \rangle &= \rho_{22} \quad .
 \end{aligned}
 \tag{A.7}$$

Realizaremos o cálculo para o anti-comutador presente no dissipador:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} [\langle 1 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 1 \rangle + \langle 1 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 1 \rangle] &= \rho_{11} \\
 \frac{1}{2} [\langle 2 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 2 \rangle + \langle 2 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 2 \rangle] &= \rho_{22} \\
 \frac{1}{2} [\langle 3 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 3 \rangle + \langle 3 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 3 \rangle] &= 0 \\
 \frac{1}{2} [\langle 4 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 4 \rangle + \langle 4 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 4 \rangle] &= 0 \quad .
 \end{aligned}
 \tag{A.8}$$

Para o termo $\sigma_1^- \rho \sigma_1^+$ do dissipador (A.2), obtemos:

$$\begin{aligned}
 \langle 1 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 1 \rangle &= \rho_{33} \\
 \langle 2 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 2 \rangle &= \rho_{44} \\
 \langle 3 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 3 \rangle &= 0 \\
 \langle 4 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 4 \rangle &= 0 \quad .
 \end{aligned}
 \tag{A.9}$$

Realizando o cálculo para o anti-comutador:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2}[\langle 1 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 1 \rangle + \langle 1 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 1 \rangle] &= 0 \\
 \frac{1}{2}[\langle 2 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 2 \rangle + \langle 2 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 2 \rangle] &= 0 \\
 \frac{1}{2}[\langle 3 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 3 \rangle + \langle 3 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 3 \rangle] &= \rho_{33} \\
 \frac{1}{2}[\langle 4 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 4 \rangle + \langle 4 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 4 \rangle] &= \rho_{44} \quad .
 \end{aligned}
 \tag{A.10}$$

O procedimento para o cálculo do dissipador $\mathcal{D}_R(\rho)$ é o mesmo. Encontramos:

$$\begin{aligned}
 \langle 1 | \sigma_N^+ \rho \sigma_N^- | 1 \rangle &= 0 \\
 \langle 2 | \sigma_N^+ \rho \sigma_N^- | 2 \rangle &= \rho_{11} \\
 \langle 3 | \sigma_N^+ \rho \sigma_N^- | 3 \rangle &= 0 \\
 \langle 4 | \sigma_N^+ \rho \sigma_N^- | 4 \rangle &= \rho_{33} \quad .
 \end{aligned}
 \tag{A.11}$$

Realizaremos o cálculo para o anti-comutador presente no dissipador:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2}[\langle 1 | \sigma_N^- \sigma_N^+ \rho | 1 \rangle + \langle 1 | \rho \sigma_N^- \sigma_N^+ | 1 \rangle] &= \rho_{11} \\
 \frac{1}{2}[\langle 2 | \sigma_N^- \sigma_N^+ \rho | 2 \rangle + \langle 2 | \rho \sigma_N^- \sigma_N^+ | 2 \rangle] &= 0 \\
 \frac{1}{2}[\langle 3 | \sigma_N^- \sigma_N^+ \rho | 3 \rangle + \langle 3 | \rho \sigma_N^- \sigma_N^+ | 3 \rangle] &= \rho_{33} \\
 \frac{1}{2}[\langle 4 | \sigma_N^- \sigma_N^+ \rho | 4 \rangle + \langle 4 | \rho \sigma_N^- \sigma_N^+ | 4 \rangle] &= 0 \quad .
 \end{aligned}
 \tag{A.12}$$

Para o termo $\sigma_N^- \rho \sigma_N^+$ do dissipador (A.3), obtemos:

$$\begin{aligned}
 \langle 1 | \sigma_N^- \rho \sigma_N^+ | 1 \rangle &= \rho_{22} \\
 \langle 2 | \sigma_N^- \rho \sigma_N^+ | 2 \rangle &= 0 \\
 \langle 3 | \sigma_N^- \rho \sigma_N^+ | 3 \rangle &= \rho_{44} \\
 \langle 4 | \sigma_N^- \rho \sigma_N^+ | 4 \rangle &= 0 \quad .
 \end{aligned}
 \tag{A.13}$$

Realizando o cálculo para o anti-comutador:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} [\langle 1 | \sigma_N^+ \sigma_N^- \rho | 1 \rangle + \langle 1 | \rho \sigma_N^- \sigma_N^+ | 1 \rangle] &= 0 \\
 \frac{1}{2} [\langle 2 | \sigma_N^+ \sigma_N^- \rho | 2 \rangle + \langle 2 | \rho \sigma_N^- \sigma_N^+ | 2 \rangle] &= \rho_{22} \\
 \frac{1}{2} [\langle 3 | \sigma_N^+ \sigma_N^- \rho | 3 \rangle + \langle 3 | \rho \sigma_N^- \sigma_N^+ | 3 \rangle] &= 0 \\
 \frac{1}{2} [\langle 4 | \sigma_N^+ \sigma_N^- \rho | 4 \rangle + \langle 4 | \rho \sigma_N^- \sigma_N^+ | 4 \rangle] &= \rho_{44} \quad .
 \end{aligned}
 \tag{A.14}$$

Coletando os resultados de (A.7) até (A.14), obtemos o conjunto de equações (2.43):

$$\begin{aligned}
 0 &= -(X_L^+ + X_R^-) \rho_{22} + X_R^+ \rho_{11} + 0 + X_L^- \rho_{44} \\
 0 &= X_R^- \rho_{22} - (X_L^+ + X_R^+) \rho_{11} + X_L^- \rho_{33} + 0 \\
 0 &= 0 + X_L^+ \rho_{11} - (X_L^- + X_R^+) \rho_{33} + X_R^- \rho_{44} \\
 0 &= X_L^+ \rho_{22} + 0 + X_R^+ \rho_{33} - (X_L^- + X_R^-) \rho_{44} \quad .
 \end{aligned}
 \tag{A.15}$$

Ao resolver este sistema, vemos que existe uma relação entre cada equação, de tal modo que a soma das três primeiras resulta na quarta com sinal oposto:

$$\rho_{44} = \frac{X_L^+ \rho_{22} + X_R^+ \rho_{33}}{X_L^- + X_R^-} \quad .
 \tag{A.16}$$

Substituindo na primeira equação, temos:

$$\begin{aligned}
 0 &= -(X_L^+ + X_R^-)\rho_{22} + X_R^+\rho_{11} + \frac{X_L^-}{X_L^- + X_R^-}[X_L^+\rho_{22} + X_R^+\rho_{33}] \\
 0 &= \rho_{22} \left[\frac{X_L^+ X_L^- - (X_L^+ + X_R^-)(X_R^- + X_L^-)}{X_L^- + X_R^-} \right] + X_R^+\rho_{11} + \left(\frac{X_L^+ X_R^+}{X_L^- + X_R^-} \right) \rho_{33} \\
 0 &= -\rho_{22} \left[\frac{X_R^-(X_L^+ + X_L^- + X_R^-)}{X_L^- + X_R^-} \right] + X_R^+\rho_{11} + \left(\frac{X_L^- X_R^+}{X_L^- + X_R^-} \right) \rho_{33} \\
 0 &= -[X_R^-(X_L^+ + X_L^- + X_R^-)]\rho_{22} + X_R^+(X_L^- + X_R^-)\rho_{11} + X_L^- X_R^+ \rho_{33} \quad .
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

Substituindo (A.16) na terceira equação de (A.15), temos:

$$\begin{aligned}
 0 &= X_L^+\rho_{11} - (X_L^- + X_R^+)\rho_{33} + \left(\frac{X_R^-}{X_L^- + X_R^-} \right) [X_L^+\rho_{22} + X_R^+\rho_{33}] \\
 0 &= \left(\frac{X_R^- X_L^+}{X_L^- + X_R^-} \right) \rho_{22} + X_L^+\rho_{11} - \left[\frac{X_L^-(X_L^+ + X_R^- + X_R^+)}{X_L^- + X_R^-} \right] \\
 0 &= X_R^- X_L^+ \rho_{22} + X_L^+(X_L^- + X_R^-)\rho_{11} - [X_L^-(X_L^- + X_R^- + X_R^+)]\rho_{33} \quad .
 \end{aligned}$$

Note que somando a primeira equação com a terceira, obtemos o fator $-(X + X)$ multiplicando a segunda. Da segunda equação, podemos escrever:

$$\rho_{33} = \frac{(X_L^+ + X_R^+)\rho_{11} - X_R^-\rho_{22}}{X_L^-} \quad , \tag{A.18}$$

e substituindo este resultado na expressão em (A.17), obtemos:

$$0 = -[X_R^-(X_R^+ + X_R^- + X_L^+ + X_L^-)]\rho_{22} + \rho_{11}[X_R^+(X_L^+ + X_L^- + X_R^+ + X_R^-)]\rho_{11}$$

$$\boxed{\rho_{11} = \frac{X_R^-}{X_R^+} \rho_{22}} \quad . \tag{A.19}$$

Para ρ_{33} , encontramos via (A.18):

$$\boxed{\rho_{33} = \frac{X_R^- X_L^+}{X_R^+ X_L^-} \rho_{22}} \quad . \tag{A.20}$$

Para ρ_{44} via (A.16), temos:

$$\boxed{\rho_{44} = \frac{X_L^+}{X_L^-} \rho_{22}} \quad . \quad (\text{A.21})$$

Impondo a condição da matriz densidade, $Tr\rho = 1$, encontramos o valor de ρ_{22} :

$$\frac{X_R^-}{X_R^+} \rho_{22} + \rho_{22} + \frac{X_R^- X_L^+}{X_R^+ X_L^-} \rho_{22} + \frac{X_L^+}{X_L^-} \rho_{22} = 1. \quad (\text{A.22})$$

Note que:

$$\begin{cases} X_{L(R)}^\pm = 2(1 \pm f_{L(R)}) \\ X_{L(R)}^+ + X_{L(R)}^- = 2 + 2f_{L(R)} + 2 - 2f_{L(R)} = 4 \end{cases}, \quad (\text{A.23})$$

obtemos o valor de ρ_{22} :

$$\boxed{\rho_{22} = \frac{X_R^+ X_L^-}{16}} \quad . \quad (\text{A.24})$$

Substituindo (A.24) em (A.19), (A.20) e (A.21), encontramos a matriz densidade no *NESS*:

$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{X_R^- X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{X_R^+ X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{X_R^- X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{X_R^+ X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} \end{bmatrix} \quad . \quad (\text{A.25})$$

Prosseguiremos o cálculo das componentes da energia do sistema: \dot{Q} e \dot{W} . Vimos que através do protocolo de interações repetidas, deduzido no começo do capítulo 2, que o calor recebido pelo sistema e o trabalho realizado sobre ele é dado por:

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= -Tr \left\{ \left(v_i H_i v_i - \frac{1}{2} \{v_i^2, H_i\} \right) \rho_S \otimes \omega_{\beta_i} \right\} \\ \dot{W} &= Tr \left\{ v_i \left(H_S + H_i \right) v_i - \frac{1}{2} \{v_i^2, H_S + H_r\} \right\} \rho_S \otimes \omega_{\beta_i} \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Nesta expressão, temos que $H_i = h_i \sigma_z / 2$ e $v_i = \sqrt{\gamma} (\sigma_i^x \sigma_1^x + \sigma_i^y \sigma_1^y)$ com $i = L, R$. Para o calor, temos:

$$\dot{Q}_L = -Tr \left\{ \left[\sqrt{\gamma}(\sigma_L^x \sigma_1^x + \sigma_L^y \sigma_1^y) \frac{h_L \sigma_L^z}{2} \sqrt{\gamma}(\sigma_L^x \sigma_1^x + \sigma_L^y \sigma_1^y) - \frac{\gamma h_L}{2} \{(\sigma_i^x \sigma_1^x + \sigma_i^y \sigma_1^y), \sigma_L^z\} \right] \rho_T \right\} .$$

Abrindo os produtos nesta expressão, obtemos:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_L = & -\frac{\gamma h_L}{2} Tr \{ \sigma_L^x \sigma_L^z \sigma_L^x \rho_T + \sigma_L^x \sigma_L^z \sigma_L^y \rho_L \sigma_1^x \sigma_1^y \rho_S \rho_R + \sigma_L^y \sigma_L^z \sigma_L^x \rho_L \sigma_1^x \sigma_1^y \rho_S \rho_R \\ & + \sigma_L^y \sigma_L^z \sigma_L^y \rho_T - \frac{1}{2} (2 \sigma_L^z \rho_T + \sigma_L^x \sigma_L^y \sigma_L^z \rho_L \sigma_1^x \sigma_1^y \rho_S \rho_R + \\ & + \sigma_L^y \sigma_L^x \sigma_L^z \rho_L \sigma_1^y \sigma_1^x \rho_S \rho_R + 2 \sigma_L^z \rho_T + \sigma_L^z \sigma_L^x \sigma_L^y \rho_L \sigma_1^x \sigma_1^y \rho_S \rho_R + \sigma_L^z \sigma_L^y \sigma_L^x \rho_L \sigma_1^y \sigma_1^x \rho_S \rho_R) \} . \end{aligned}$$

Os operadores de spin de Pauli satisfazem às seguintes propriedades:

$$\left\{ \begin{array}{l} (\sigma^x)^2 = (\sigma^y)^2 = (\sigma^z)^2 = 1 \\ \sigma^x \sigma^y = -\sigma^y \sigma^x = i \sigma^z \\ \sigma^y \sigma^z = -\sigma^z \sigma^y = i \sigma^x \\ \sigma^z \sigma^x = -\sigma^x \sigma^z = i \sigma^y \end{array} \right. . \quad (\text{A.27})$$

Fazendo a substituição de (A.27) na expressão para o calor, obtemos:

$$\dot{Q}_L = -\frac{\gamma h_L}{2} [-4f_L + 4Tr^S \sigma_1^z \rho_S] ,$$

onde definimos $f_L = Tr^L \sigma_L^z \rho_L = \langle \sigma_L^z \rangle$. Portanto:

$$\boxed{\dot{Q}_L = 2\gamma h_L [f_L - Tr^S \sigma_1^z \rho_S]} . \quad (\text{A.28})$$

Prosseguiremos para o cálculo da corrente de trabalho. Temos que expandir o traço presente na equação (2.25):

$$\dot{W} = -Tr \left\{ v_i \left(H_S + H_i \right) v_i - \frac{1}{2} \left\{ v_i^2, H_S + H_r \right\} \right\} \rho_S \otimes \omega_{\beta_i} , \quad (\text{A.29})$$

onde H_S é dado por (2.36) com $N = 2$ e $H_i = h_i \sigma_i^z / 2$. Vamos reescalar os constantes para facilitar as contas: $h' \rightarrow h/2$ e $\Delta' \rightarrow \Delta/2$.

Vamos abrir esta conta em partes:

- Para o termo: $v_L(h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + h'_L\sigma_L^z)v_L$:

$$\begin{aligned}
 &= \gamma[h'_1\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_1^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_1\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_1^z\sigma_L^y\sigma_1^y + h'_1\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_1^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_1\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_1^z\sigma_L^y\sigma_1^y + \\
 &+ h'_2\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_2^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_2\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_2^z\sigma_L^y\sigma_1^y + h'_2\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_2^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_2\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_2^z\sigma_L^y\sigma_1^y + \\
 &+ h'_L\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_L^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_L\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_L^z\sigma_L^y\sigma_1^y + h'_L\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_L^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_L\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_L^z\sigma_L^y\sigma_1^y + \\
 &+ \Delta'_{1,2}\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_L^x\sigma_1^x + \Delta'_{1,2}\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_L^y\sigma_1^y + \Delta'_{1,2}\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_L^x\sigma_1^x + \Delta'_{1,2}\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_L^y\sigma_1^y] \quad .
 \end{aligned}$$

Usando as relações das matrizes de Pauli (A.27), encontramos:

$$\begin{aligned}
 &= 2\gamma[h'_1\sigma_L^z - h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z - h'_2\sigma_L^z\sigma_2^z \\
 &+ \Delta'_{1,2}\sigma_L^z\sigma_2^z - \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + h'_L\sigma_1^z - h'_L\sigma_L^z] \quad .
 \end{aligned} \tag{A.30}$$

- Para o termo $\{v_L^2, H_S + H_L\}$

$$\begin{aligned}
 &= \gamma[(\sigma_L^x\sigma_1^x + \sigma_L^y\sigma_1^y)(\sigma_L^x\sigma_1^x + \sigma_L^y\sigma_1^y)(h'_L\sigma_L^z + h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z) + \\
 &+ (h'_L\sigma_L^z + h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z)(\sigma_L^x\sigma_1^x + \sigma_L^y\sigma_1^y)(\sigma_L^x\sigma_1^x + \sigma_L^y\sigma_1^y)] \quad .
 \end{aligned}$$

Reagrupando os produtos:

$$\begin{aligned}
 &= \gamma[4(h'_L\sigma_L^z + h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z) + \\
 &+ \sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_L^y\sigma_1^y(h'_L\sigma_L^z + h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z) + \\
 &+ \sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_L^x\sigma_1^x(h'_L\sigma_L^z + h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z) + \\
 &+ (h'_L\sigma_L^z + h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z)\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_L^y\sigma_1^y + \\
 &+ (h'_L\sigma_L^z + h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z)\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_L^x\sigma_1^x] \quad .
 \end{aligned}$$

Note que $\sigma_L^x \sigma_1^x \sigma_L^y \sigma_1^y = -\sigma_L^z \sigma_1^z$ e $\sigma_L^y \sigma_1^y \sigma_L^x \sigma_1^x = -\sigma_L^z \sigma_1^z$. Portanto temos:

$$\begin{aligned}
 &= \gamma[4(h'_L \sigma_L^z + h'_1 \sigma_1^z + h'_2 \sigma_2^z + \Delta_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z) + \\
 &\quad + 4(-h'_L \sigma_1^z - h'_1 \sigma_L^z - h'_2 \sigma_L^z \sigma_1^z \sigma_2^z - \Delta_{1,2} \sigma_2^z \sigma_L^z)] \quad .
 \end{aligned}$$

Substituindo na expressão para o trabalho, encontramos:

$$\begin{aligned}
 \dot{W}_L = Tr \{ & [2\gamma h'_1 \sigma_L^z - 2\gamma h'_1 \sigma_1^z + 2\gamma h'_2 \sigma_2^z - 2\gamma h'_2 \sigma_L^z \sigma_1^z \sigma_2^z \\
 & + 2\gamma \Delta'_{1,2} \sigma_L^z \sigma_2^z - 2\gamma \Delta'_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z + 2\gamma h'_L \sigma_1^z - 2\gamma h'_L \sigma_L^z \\
 & - 2\gamma h'_L \sigma_L^z - 2\gamma h'_1 \sigma_1^z - 2\gamma h'_2 \sigma_2^z - 2\gamma \Delta'_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z \\
 & + 2\gamma h'_L \sigma_1^z + 2\gamma h'_1 \sigma_L^z + 2\gamma h'_2 \sigma_L^z \sigma_1^z \sigma_2^z + 2\gamma \Delta'_{1,2} \sigma_2^z \sigma_L^z] \rho_T \} \quad .
 \end{aligned}$$

Agrupado os termos encontramos:

$$\begin{aligned}
 \dot{W}_L = Tr \{ & [4\gamma h'_1 \sigma_L^z - 4\gamma h'_1 \sigma_1^z + 4\gamma \Delta'_{1,2} \sigma_L^z \sigma_2^z - 4\gamma \Delta'_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z \\
 & + 4\gamma h'_L \sigma_1^z - 4\gamma h'_L \sigma_L^z] \rho_T \} \quad .
 \end{aligned}$$

Note que $\rho_T = \rho_S \otimes \rho_E$, portanto ao realizarmos o traço temos:

$$\begin{aligned}
 \dot{W}_L = & 4\gamma h'_1 f_L - 4\gamma h'_1 Tr^S \sigma_1^z \rho_S \\
 & - 4\gamma \Delta_{1,2} Tr^S \sigma_1^z \sigma_2^z \rho_S + 4\gamma h'_L Tr^S \sigma_1^z \rho_S - 4\gamma h'_L f_L \quad .
 \end{aligned}$$

Voltando para escala original da interação do Hamiltoniano, $h' \rightarrow h/2$, encontramos o valor final do trabalho:

$$\boxed{
 \begin{aligned}
 \dot{W}_L = & 2\gamma h_1 (f_L - Tr^S \sigma_1^z \rho_S) - 2\gamma h_L (f_L - Tr^S \sigma_1^z \rho_S) \\
 & - 2\gamma \Delta_{1,2} f_L Tr^S \sigma_2^z \rho_S + 2\gamma \Delta_{1,2} f_L Tr^S \sigma_2^z \rho_S
 \end{aligned}
 } \quad . \quad (A.31)$$

Por simetria, podemos calcular os valores das correntes que envolvem o ultimo spin. Para isso basta fazer a troca de índices:

$$\begin{aligned}
 L &\rightarrow R \\
 1 &\rightarrow N \quad , \quad (A.32)
 \end{aligned}$$

encontramos:

$$\boxed{\dot{Q}_R = 2\gamma h_R [f_R - Tr^S \sigma_2^z \rho_S]} \quad (\text{A.33})$$

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{W}_R &= 2\gamma h_2 (f_R - Tr^S \sigma_2^z \rho_S) - 2\gamma h_R (f_R - Tr^S \sigma_2^z \rho_S) \\ &\quad - 2\gamma \Delta_{1,2} f_R Tr^S \sigma_1^z \sigma_2^z \rho_S + 2\gamma \Delta_{1,2} f_L Tr^S \sigma_1^z \rho_S \end{aligned}} \quad (\text{A.34})$$

Com as expressões para a corrente de calor, trabalho e a matriz do estado estacionário de não equilíbrio em mãos, podemos calcular os valores esperados presente nas correntes. Para isso, temos que escrever os operadores $\sigma_{1(2)}^z$ na base do Hamiltoniano. Note que $\sigma_1^z = \sigma_1^z \otimes \mathcal{I}$ e $\sigma_2^z = \mathcal{I} \otimes \sigma_2^z$, ou seja, $\sigma_{1(2)}^z$ está atuando no primeiro sítio e trivialmente nos demais. Sendo assim, temos os seguintes valores:

$$Tr\{\sigma_1^z \rho_S\} = Tr \left\{ \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{X_R^- X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{X_R^+ X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{X_R^- X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{X_R^+ X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} \end{bmatrix} \right\} \quad (\text{A.35})$$

$$\boxed{Tr\{\sigma_1^z \rho_S\} = f_L} \quad (\text{A.36})$$

Avaliando o termo $\sigma_1^z \sigma_2^z$:

$$Tr\{\sigma_1^z \sigma_2^z \rho_S\} = Tr \left\{ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{X_R^- X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{X_R^+ X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{X_R^- X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{X_R^+ X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} \end{bmatrix} \right\} \quad (\text{A.37})$$

$$\boxed{Tr\{\sigma_1^z \sigma_2^z \rho_S\} = f_L f_R} \quad (\text{A.38})$$

Para o último termo envolvendo o ultimo spin, temos:

$$Tr\{\sigma_2^z \rho_S\} = Tr \left\{ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{X_R^- X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{X_R^+ X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{X_R^- X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{X_R^+ X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} \end{bmatrix} \right\} \quad (\text{A.39})$$

$$\boxed{Tr\{\sigma_2^z \rho_S\} = f_R} \quad (\text{A.40})$$

Facilmente, podemos concluir o resultado para a corrente de energia. Unindo os resultados (A.28), (A.31), (A.33), (A.34), (A.36), (A.38) e (A.40) temos:

$$\begin{cases} \dot{Q}_L = 0 \\ \dot{Q}_R = 0 \\ \dot{W}_L = 0 \\ \dot{W}_R = 0 \end{cases} . \quad (\text{A.41})$$

Vemos portanto que temos um fluxo nulo da corrente de energia, devido ao fato de cada corrente (Calor e Trabalho) se anularem individualmente.

Prosseguiremos com os resultados analíticos para o modelo de Ising composto de 3 spins. O Hamiltoniano de interesse é dado por:

$$H_S = \frac{h_1}{2}\sigma_1^z + \frac{h_2}{2}\sigma_2^z + \frac{h_3}{2}\sigma_3^z + \frac{\Delta_{1,2}}{2}\sigma_1^z\sigma_2^z + \frac{\Delta_{2,3}}{2}\sigma_2^z\sigma_3^z + \frac{\Delta_{1,3}}{2}\sigma_1^z\sigma_3^z.$$

Assim como anteriormente, para solucionar a matriz densidade, estudaremos um estado estacionário na forma diagonal para solucionar a equação de Linblad. Utilizaremos como base os autoestados do Hamiltoniano de Ising:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= | - + - \rangle & |2\rangle &= | - - - \rangle \\ |3\rangle &= | - - + \rangle & |4\rangle &= | - + + \rangle \\ |5\rangle &= | + + - \rangle & |6\rangle &= | + - - \rangle \\ |7\rangle &= | + - + \rangle & |8\rangle &= | + + + \rangle . \end{aligned}$$

Utilizando as propriedades presentes em (A.6), temos:

$$\begin{aligned} \langle 1 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 1 \rangle &= 0 & \langle 5 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 5 \rangle &= \rho_{11} \\ \langle 2 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 2 \rangle &= 0 & \langle 6 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 6 \rangle &= \rho_{22} \\ \langle 3 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 3 \rangle &= 0 & \langle 7 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 7 \rangle &= \rho_{33} \\ \langle 4 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 4 \rangle &= 0 & \langle 8 | \sigma_1^+ \rho \sigma_1^- | 8 \rangle &= \rho_{44} . \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

Realizando o cálculo para o anti-comutador presente no dissipador:

$$\frac{1}{2}[\langle 1 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 1 \rangle + \langle 1 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 1 \rangle] = \rho_{11}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 2 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 2 \rangle + \langle 2 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 2 \rangle] = \rho_{22}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 3 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 3 \rangle + \langle 3 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 3 \rangle] = \rho_{33}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 4 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 4 \rangle + \langle 4 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 4 \rangle] = \rho_{44}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 5 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 5 \rangle + \langle 5 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 5 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 6 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 6 \rangle + \langle 6 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 6 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 7 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 7 \rangle + \langle 7 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 7 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 8 | \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho | 8 \rangle + \langle 8 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 8 \rangle] = 0 \quad .$$

Para o termo $\sigma_1^- \rho \sigma_1^+$ do dissipador (A.2) com os auto-estados de $N = 3$:

$$\langle 1 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 1 \rangle = \rho_{55} \quad \langle 5 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 5 \rangle = 0$$

$$\langle 2 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 2 \rangle = \rho_{66} \quad \langle 6 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 6 \rangle = 0$$

$$\langle 3 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 3 \rangle = \rho_{77} \quad \langle 7 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 7 \rangle = 0$$

$$\langle 4 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 4 \rangle = \rho_{88} \quad \langle 8 | \sigma_1^- \rho \sigma_1^+ | 8 \rangle = 0 \quad .$$

(A.43)

Realizando o cálculo para o anti-comutador:

$$\frac{1}{2}[\langle 1 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 1 \rangle + \langle 1 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 1 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 2 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 2 \rangle + \langle 2 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 2 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 3 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 3 \rangle + \langle 3 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 3 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 4 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 4 \rangle + \langle 4 | \rho \sigma_1^+ \sigma_1^- | 4 \rangle] = 0$$

(A.44)

$$\frac{1}{2}[\langle 5 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 5 \rangle + \langle 5 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 5 \rangle] = \rho_{55}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 6 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 6 \rangle + \langle 6 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 6 \rangle] = \rho_{66}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 7 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 7 \rangle + \langle 7 | \rho \sigma_1^- \sigma_1^+ | 7 \rangle] = \rho_{77}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 8 | \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho | 8 \rangle + \langle 8 | \rho \sigma_1^+ \sigma_1^- | 8 \rangle] = \rho_{88} \quad .$$

Vamos calcular a interação do dissipador (A.3) com a matriz densidade. Para o termo σ_3^\pm temos:

$$\langle 1 | \sigma_3^+ \rho \sigma_3^- | 1 \rangle = 0 \quad \langle 5 | \sigma_3^+ \rho \sigma_3^- | 5 \rangle = 0$$

$$\langle 2 | \sigma_3^+ \rho \sigma_3^- | 2 \rangle = 0 \quad \langle 6 | \sigma_3^+ \rho \sigma_3^- | 6 \rangle = 0$$

(A.45)

$$\langle 3 | \sigma_3^+ \rho \sigma_3^- | 3 \rangle = \rho_{22} \quad \langle 7 | \sigma_3^+ \rho \sigma_3^- | 7 \rangle = \rho_{66}$$

$$\langle 4 | \sigma_3^+ \rho \sigma_3^- | 4 \rangle = \rho_{11} \quad \langle 8 | \sigma_3^+ \rho \sigma_3^- | 8 \rangle = \rho_{55} \quad .$$

Realizando o cálculo para o anti-comutador presente no dissipador:

$$\frac{1}{2}[\langle 1 | \sigma_3^- \sigma_3^+ \rho | 1 \rangle + \langle 1 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 1 \rangle] = \rho_{11}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 2 | \sigma_3^- \sigma_3^+ \rho | 2 \rangle + \langle 2 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 2 \rangle] = \rho_{22}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 3 | \sigma_3^- \sigma_3^+ \rho | 3 \rangle + \langle 3 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 3 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 4 | \sigma_3^- \sigma_3^+ \rho | 4 \rangle + \langle 4 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 4 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 5 | \sigma_3^- \sigma_3^+ \rho | 5 \rangle + \langle 5 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 5 \rangle] = \rho_{55}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 6 | \sigma_3^- \sigma_3^+ \rho | 6 \rangle + \langle 6 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 6 \rangle] = \rho_{66}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 7 | \sigma_3^- \sigma_3^+ \rho | 7 \rangle + \langle 7 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 7 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 8 | \sigma_3^- \sigma_3^+ \rho | 8 \rangle + \langle 8 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 8 \rangle] = 0 \quad .$$

Para o termo $\sigma_3^- \rho \sigma_3^+$ do dissipador (A.2) com os auto-estados de $N = 3$:

$$\langle 1 | \sigma_3^- \rho \sigma_3^+ | 1 \rangle = \rho_{44} \quad \langle 5 | \sigma_3^- \rho \sigma_3^+ | 5 \rangle = \rho_{88}$$

$$\langle 2 | \sigma_3^- \rho \sigma_3^+ | 2 \rangle = \rho_{33} \quad \langle 6 | \sigma_3^- \rho \sigma_3^+ | 6 \rangle = \rho_{77}$$

$$\langle 3 | \sigma_3^- \rho \sigma_3^+ | 3 \rangle = 0 \quad \langle 7 | \sigma_3^- \rho \sigma_3^+ | 7 \rangle = 0$$

$$\langle 4 | \sigma_3^- \rho \sigma_3^+ | 4 \rangle = 0 \quad \langle 8 | \sigma_3^- \rho \sigma_3^+ | 8 \rangle = 0 \quad .$$

(A.46)

Realizando o cálculo para o anti-comutador:

$$\frac{1}{2}[\langle 1 | \sigma_3^+ \sigma_3^- \rho | 1 \rangle + \langle 1 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 1 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 2 | \sigma_3^+ \sigma_3^- \rho | 2 \rangle + \langle 2 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 2 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 3 | \sigma_3^+ \sigma_3^- \rho | 3 \rangle + \langle 3 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 3 \rangle] = \rho_{33}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 4 | \sigma_3^+ \sigma_3^- \rho | 4 \rangle + \langle 4 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 4 \rangle] = \rho_{44}$$

(A.47)

$$\frac{1}{2}[\langle 5 | \sigma_3^+ \sigma_3^- \rho | 5 \rangle + \langle 5 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 5 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 6 | \sigma_3^+ \sigma_3^- \rho | 6 \rangle + \langle 6 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 6 \rangle] = 0$$

$$\frac{1}{2}[\langle 7 | \sigma_3^+ \sigma_3^- \rho | 7 \rangle + \langle 7 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 7 \rangle] = \rho_{77}$$

$$\frac{1}{2}[\langle 8 | \sigma_3^+ \sigma_3^- \rho | 8 \rangle + \langle 8 | \rho \sigma_3^- \sigma_3^+ | 8 \rangle] = \rho_{88} \quad .$$

Reunindo os resultados encontrados, obtemos as 8 equações para as componentes da matriz densidade. Vemos que é possível decompor o conjunto de equações em dois blocos, o primeiro para as componentes 1, 4, 5, 8 e o segundo para as componentes 2, 3, 6, 7. Obtemos para o primeiro grupo:

$$\begin{aligned} 0 &= -(X_L^+ + X_R^-)\rho_{44} + 0 + X_R^+\rho_{11} + 0 + X_L^-\rho_{88} \\ 0 &= X_R^-\rho_{44} - (X_L^+ + X_R^+)\rho_{11} + X_L^-\rho_{55} + 0 \\ 0 &= 0 + X_L^+\rho_{11} - (X_L^- + X_R^+)\rho_{55} + X_R^-\rho_{88} \\ 0 &= X_L^+\rho_{44} + 0 + X_R^+\rho_{55} - (X_L^- + X_R^-)\rho_{88} \quad . \end{aligned} \tag{A.48}$$

Para o segundo grupo de equações, encontramos:

$$\begin{aligned} 0 &= -(X_L^+ + X_R^-)\rho_{33} + X_R^+\rho_{22} + 0 + X_L^-\rho_{77} \\ 0 &= X_R^-\rho_{33} - (X_L^+ + X_R^+)\rho_{22} + X_L^-\rho_{66} + 0 \\ 0 &= 0 + X_L^+\rho_{22} - (X_L^- + X_R^+)\rho_{66} + X_R^-\rho_{77} \\ 0 &= X_L^+\rho_{33} + 0 + X_R^+\rho_{66} - (X_L^- + X_R^-)\rho_{77} \quad . \end{aligned} \tag{A.49}$$

Comparando (A.48) com (A.15), vemos que são sistemas idênticos, embora tenham índices diferentes. Fazendo a seguinte analogia entre os índices:

Tabela 1 – Relação entre os índices entre as equações dos sistemas N=2 e N=3 para o grupo I de equações

N=2	N=3	
2	4	
1	1	.
3	5	
4	8	

Inferimos a resposta final através da solução de $N = 2$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_{11} = \frac{X_R^-}{X_R^+} \rho_{44} \\ \rho_{55} = \frac{X_R^- X_L^+}{X_R^+ X_L^-} \rho_{44} \\ \rho_{88} = \frac{X_L^+}{X_L^-} \rho_{44} \end{array} \right. \quad . \quad (A.50)$$

Fazendo o mesmo procedimento para o segundo grupo, obtemos:

Tabela 2 – Relação entre os índices entre as equações dos sistemas N=2 e N=3 para o grupo II de equações

N=2	N=3	
2	3	
1	2	.
3	6	
4	7	

Inferimos a resposta final através da solução de $N = 2$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_{22} = \frac{X_R^-}{X_R^+} \rho_{33} \\ \rho_{66} = \frac{X_R^- X_L^+}{X_R^+ X_L^-} \rho_{33} \\ \rho_{77} = \frac{X_L^+}{X_L^-} \rho_{33} \end{array} \right. \quad . \quad (A.51)$$

Com as soluções para as componentes da matriz densidade, temos que usar a propriedade que ela satisfaz:

$$\sum_i \rho_{ii} = 1$$

$$(\rho_{33} + \rho_{44}) \left[\frac{X_R^-}{X_R^+} + \frac{X_R^- X_L^+}{X_R^+ X_L^-} + \frac{X_L^+}{X_L^-} + 1 \right] = 1 \quad .$$

Obtemos o resultado final:

$$\boxed{(\rho_{33} + \rho_{44}) = \frac{X_R^+ X_L^-}{16}} \quad . \quad (\text{A.52})$$

Observamos que podemos generalizar o resultado de tal modo que todos os estados estacionários na forma diagonal são escolhidos. Vamos supor que as componentes acima são diferentes, de tal modo que seja válida a relação $\sum_i \rho_{ii} = 1$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_{22} = \alpha_1 \rho \quad \rho_{44} = \alpha_2 \rho \\ \alpha_1 \rho + \alpha_2 \rho = \frac{X_R^+ X_L^-}{16} \\ \rho = \frac{1}{(\alpha_1 + \alpha_2)} \frac{X_R^+ X_L^-}{16} \end{array} \right. \quad . \quad (\text{A.53})$$

Portanto, vemos que a matriz densidade resultante fica escrita como:

$$\rho = \begin{bmatrix} \nu_1 \frac{X_R^- X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \nu_1 \frac{X_R^+ X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu_2 \frac{X_R^- X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \nu_2 \frac{X_R^+ X_L^-}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu_1 \frac{X_R^- X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu_1 \frac{X_R^+ X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu_2 \frac{X_R^- X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu_2 \frac{X_R^+ X_L^+}{16\gamma_L \gamma_R} \end{bmatrix} \quad ,$$

onde temos que:

$$\nu_{1(2)} = \frac{\alpha_{1(2)}}{\alpha_1 + \alpha_2} \quad ,$$

com α_i constantes positivas.

Vamos calcular as expressões para a corrente de calor e de trabalho. Note que, por (A.16), a expressão para o calor é a mesma obtida para o caso $N = 2$. Assim como no caso $N = 2$, vamos reescalar as constantes de interação para $h' \rightarrow h/2$. Abrindo a conta dada pela equação (A.29) em partes, temos:

- Para o termo: $v_L(h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + h'_3\sigma_3^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + \Delta'_{2,3}\sigma_2^z\sigma_3^z + \Delta'_{1,3}\sigma_1^z\sigma_3^z + h'_L\sigma_L^z)v_L$:

$$\begin{aligned}
 &= \gamma[h'_1\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_1^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_1\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_1^z\sigma_L^y\sigma_1^y + h'_1\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_1^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_1\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_1^z\sigma_L^y\sigma_1^y + \\
 &\quad + h'_2\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_2^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_2\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_2^z\sigma_L^y\sigma_1^y + h'_2\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_2^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_2\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_2^z\sigma_L^y\sigma_1^y + \\
 &\quad + h'_3\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_3^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_3\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_3^z\sigma_L^y\sigma_1^y + h'_3\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_3^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_3\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_3^z\sigma_L^y\sigma_1^y + \\
 &\quad + h'_L\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_L^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_L\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_L^z\sigma_L^y\sigma_1^y + h'_L\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_L^z\sigma_L^x\sigma_1^x + h'_L\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_L^z\sigma_L^y\sigma_1^y + \\
 &\quad + \Delta'_{1,2}\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_L^x\sigma_1^x + \Delta'_{1,2}\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_L^y\sigma_1^y + \Delta'_{1,2}\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_L^x\sigma_1^x + \Delta'_{1,2}\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_L^y\sigma_1^y \\
 &\quad + \Delta'_{2,3}\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_2^z\sigma_3^z\sigma_L^x\sigma_1^x + \Delta'_{2,3}\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_2^z\sigma_3^z\sigma_L^y\sigma_1^y + \Delta'_{2,3}\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_2^z\sigma_3^z\sigma_L^x\sigma_1^x + \Delta'_{2,3}\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_2^z\sigma_3^z\sigma_L^y\sigma_1^y \\
 &\quad + \Delta'_{1,3}\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_1^z\sigma_3^z\sigma_L^x\sigma_1^x + \Delta'_{1,3}\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_1^z\sigma_3^z\sigma_L^y\sigma_1^y + \Delta'_{1,3}\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_1^z\sigma_3^z\sigma_L^x\sigma_1^x + \Delta'_{1,3}\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_1^z\sigma_3^z\sigma_L^y\sigma_1^y] .
 \end{aligned}$$

Usando as relações das matrizes de Pauli (A.27), encontramos:

$$\begin{aligned}
 &= 2\gamma[h'_1\sigma_L^z - h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z - h'_2\sigma_L^z\sigma_1^z\sigma_2^z + h'_3\sigma_3^z - h'_3\sigma_L^z\sigma_1^z\sigma_3^z \\
 &\quad + \Delta'_{1,2}\sigma_L^z\sigma_2^z - \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + h'_L\sigma_1^z - h'_L\sigma_L^z + \Delta'_{2,3}\sigma_2^z\sigma_3^z \\
 &\quad - \Delta'_{2,3}\sigma_L^z\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_3^z - \Delta'_{1,3}\sigma_1^z\sigma_3^z + \Delta'_{1,3}\sigma_L^z\sigma_3^z] .
 \end{aligned} \tag{A.54}$$

- Para o termo $\{v_L^2, H_S + H_L\}$

$$\begin{aligned}
 &= \gamma[(\sigma_L^x\sigma_1^x + \sigma_L^y\sigma_1^y)(\sigma_L^x\sigma_1^x + \sigma_L^y\sigma_1^y)(h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + h'_3\sigma_3^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + \Delta'_{2,3}\sigma_2^z\sigma_3^z + \Delta'_{1,3}\sigma_1^z\sigma_3^z + h'_L\sigma_L^z) + \\
 &\quad (h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + h'_3\sigma_3^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + \Delta'_{2,3}\sigma_2^z\sigma_3^z + \Delta'_{1,3}\sigma_1^z\sigma_3^z + h'_L\sigma_L^z)(\sigma_L^x\sigma_1^x + \sigma_L^y\sigma_1^y)(\sigma_L^x\sigma_1^x + \sigma_L^y\sigma_1^y)]
 \end{aligned}$$

Reagrupando os produtos:

$$\begin{aligned}
 &= \gamma[4(h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + h'_3\sigma_3^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + \Delta'_{2,3}\sigma_2^z\sigma_3^z + \Delta'_{1,3}\sigma_1^z\sigma_3^z + h'_L\sigma_L^z) + \\
 &\quad + \sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_L^y\sigma_1^y(h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + h'_3\sigma_3^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + \Delta'_{2,3}\sigma_2^z\sigma_3^z + \Delta'_{1,3}\sigma_1^z\sigma_3^z + h'_L\sigma_L^z) + \\
 &\quad + \sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_L^x\sigma_1^x(h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + h'_3\sigma_3^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + \Delta'_{2,3}\sigma_2^z\sigma_3^z + \Delta'_{1,3}\sigma_1^z\sigma_3^z + h'_L\sigma_L^z) + \\
 &\quad + (h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + h'_3\sigma_3^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + \Delta'_{2,3}\sigma_2^z\sigma_3^z + \Delta'_{1,3}\sigma_1^z\sigma_3^z + h'_L\sigma_L^z)\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_L^y\sigma_1^y + \\
 &\quad + (h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + h'_3\sigma_3^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + \Delta'_{2,3}\sigma_2^z\sigma_3^z + \Delta'_{1,3}\sigma_1^z\sigma_3^z + h'_L\sigma_L^z)\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_L^x\sigma_1^x] \quad .
 \end{aligned}$$

Como havíamos usado, $\sigma_L^x\sigma_1^x\sigma_L^y\sigma_1^y = -\sigma_L^z\sigma_1^z$ e $\sigma_L^y\sigma_1^y\sigma_L^x\sigma_1^x = -\sigma_L^z\sigma_1^z$. Portanto obtemos:

$$\begin{aligned}
 &= \gamma[4(h'_1\sigma_1^z + h'_2\sigma_2^z + h'_3\sigma_3^z + \Delta'_{1,2}\sigma_1^z\sigma_2^z + \Delta'_{2,3}\sigma_2^z\sigma_3^z + \Delta'_{1,3}\sigma_1^z\sigma_3^z + h'_L\sigma_L^z) + \\
 &\quad + 4(-h'_1\sigma_L^z - h'_2\sigma_L^z\sigma_1^z\sigma_2^z - h'_3\sigma_L^z\sigma_1^z\sigma_3^z - \Delta'_{1,2}\sigma_L^z\sigma_2^z - \Delta'_{2,3}\sigma_L^z\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_3^z - \Delta'_{1,3}\sigma_L^z\sigma_3^z - h'_L\sigma_1^z)] \quad .
 \end{aligned}$$

Por fim, fazendo $h' \rightarrow h/2$, coletando os resultados e avaliando a expressão (A.29), temos a seguinte resposta:

$$\begin{aligned}
 \dot{W}_L &= 2\gamma h_1(f_L - Tr^S\sigma_1^z\rho_S) - 2\gamma h_L(f_L - Tr^S\sigma_1^z\rho_S) \\
 &\quad + 2\gamma\Delta_{1,2}f_L Tr^S\sigma_2^z\rho_S - 2\gamma\Delta_{1,2}Tr^S\sigma_1^z\sigma_2^z\rho_S \\
 &\quad - 2\gamma\Delta_{1,3}Tr^S\sigma_1^z\sigma_3^z\rho_S + 2\gamma\Delta_{1,3}f_L Tr^S\sigma_3^z\rho_S
 \end{aligned} \quad .$$

Fazendo analogia aos índices, podemos calcular o valor da corrente de trabalho que flui pelo lado direito:

$$\begin{aligned}
 \dot{W}_R &= 2\gamma h_3(f_R - Tr^S\sigma_3^z\rho_S) - 2\gamma h_R(f_R - Tr^S\sigma_3^z\rho_S) \\
 &\quad + 2\gamma\Delta_{2,3}f_R Tr^S\sigma_2^z\rho_S - 2\gamma\Delta_{2,3}Tr^S\sigma_2^z\sigma_3^z\rho_S \\
 &\quad - 2\gamma\Delta_{1,3}Tr^S\sigma_1^z\sigma_3^z\rho_S + 2\gamma\Delta_{1,3}f_L Tr^S\sigma_1^z\rho_S
 \end{aligned} \quad .$$

Com o estado estacionário de não equilíbrio, vamos calcular os valores das correntes de calor e trabalho. Para isso temos que reescrever os operadores $\sigma_{1,2,3}^z$ na base dos auto-estados do Hamiltoniano. Isso é facilmente escrito usando os auto-estados da página 57

deste apêndice. Obtemos:

$$\sigma_1^z = \text{diag}(-1, -1, -1, -1, +1, +1, +1, +1) \quad , \quad (\text{A.55})$$

logo para $\text{Tr}\{\sigma_1^z \rho_S\}$

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\sigma_1^z \rho_S\} &= \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^-}{16} (X_L^+ - X_L^-) + \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^+}{16} (X_L^- - X_L^+) \\ &+ \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^-}{16} (X_L^+ - X_L^-) + \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^+}{16} (X_L^+ - X_L^-) \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

$$\boxed{\text{Tr}\{\sigma_1^z \rho_S\} = f_L} \quad . \quad (\text{A.57})$$

Para o caso de $\sigma_1^z \sigma_2^z$, temos:

$$\sigma_1^z \sigma_2^z = \text{diag}(+1, +1, -1, -1, -1, -1, +1, +1) \quad , \quad (\text{A.58})$$

logo para $\text{Tr}\{\sigma_1^z \sigma_2^z \rho_S\}$

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\sigma_1^z \sigma_2^z \rho_S\} &= \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^+}{16} (X_L^+ - X_L^-) + \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^-}{16} (X_L^+ - X_L^-) \\ &+ \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^+}{16} (X_L^+ - X_L^-) + \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^-}{16} (X_L^+ - X_L^-) \end{aligned} \quad (\text{A.59})$$

$$\boxed{\text{Tr}\{\sigma_1^z \sigma_2^z \rho_S\} = f_L \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2 + \alpha_1} \right)} \quad . \quad (\text{A.60})$$

Para os operadores $\sigma_2^z \sigma_3^z$, temos:

$$\sigma_2^z \sigma_3^z = \text{diag}(+1, -1, -1, +1, +1, -1, -1, +1) \quad , \quad (\text{A.61})$$

logo para $\text{Tr}\{\sigma_2^z \sigma_3^z \rho_S\}$

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\sigma_2^z \sigma_3^z \rho_S\} &= \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^-}{16} (X_L^+ + X_L^-) - \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^+}{16} (X_L^+ + X_L^-) \\ &- \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^-}{16} (X_L^+ + X_L^-) + \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^+}{16} (X_L^+ + X_L^-) \end{aligned} \quad (\text{A.62})$$

$$\boxed{\text{Tr}\{\sigma_2^z \sigma_3^z \rho_S\} = f_R \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2 + \alpha_1} \right)} \quad . \quad (\text{A.63})$$

Para o caso de $\sigma_1^z \sigma_3^z$, temos:

$$\sigma_1^z \sigma_3^z = \text{diag}(+1, -1, +1, -1, +1, -1, +1, -1) \quad (\text{A.64})$$

logo para $\text{Tr}\{\sigma_1^z \sigma_3^z \rho_S\}$

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\sigma_1^z \sigma_3^z \rho_S\} &= \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^-}{16} (X_L - X_L^+) - \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^+}{16} (X_L^- - X_L^+) \\ &+ \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^-}{16} (X_L^- - X_L^+) + \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^+}{16} (X_L^+ - X_L^-) \end{aligned} \quad (\text{A.65})$$

$$\boxed{\text{Tr}\{\sigma_1^z \sigma_3^z \rho_S\} = f_L f_R} \quad . \quad (\text{A.66})$$

Por fim, para o operador σ_3^z , temos:

$$\sigma_3^z = \text{diag}(-1, +1, -1, +1, -1, +1, -1, +1) \quad , \quad (\text{A.67})$$

logo para $\text{Tr}\{\sigma_3^z \rho_S\}$

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\sigma_3^z \rho_S\} &= -\frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^-}{16} (X_L^+ + X_L^-) + \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^+}{16} (X_L^- + X_L^+) \\ &- \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^-}{16} (X_L^+ + X_L^-) + \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{X_R^+}{16} (X_L^+ + X_L^-) \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.68})$$

$$\boxed{\text{Tr}\{\sigma_3^z \rho_S\} = f_R} \quad . \quad (\text{A.69})$$

Reunindo os resultados (A.36), (A.38) e (A.40) nas expressões (A.28), (A.31), (A.33) e (A.34) encontramos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{Q}_L = 0 \\ \dot{Q}_R = 0 \\ \dot{W}_L = 0 \\ \dot{W}_R = 0 \end{array} \right. \quad . \quad (\text{A.70})$$

Novamente vemos que o fluxo de energia é nulo devido a cada componente se anular individualmente.

Daremos continuidade à análise do modelo de Ising estudando os reservatórios bosônicos. Para este reservatório, temos o seguinte Hamiltoniano de interação:

$$H_{spin-bath}^{L(R)} = \sigma_x^{1(N)} g_{L(R)} \left(a^{L(R)} + a^{L(R)\dagger} \right) \quad , \quad (\text{A.71})$$

cujo Hamiltoniano dos reservatórios são dados por:

$$H_{bath}^{L(R)} = \omega_{L(R)} \left(a^{L(R)\dagger} a^{L(R)} \right) , \quad (\text{A.72})$$

onde $a^{\dagger L(R)}$ e $a^{L(R)}$ são os operadores de criação e aniquilação de modos bosônicos. Este modelo implica que os banhos só podem promover flips de um único spin por vez, sempre sendo o primeiro ou o último spin da cadeia, portanto transições envolvendo mais de um spin são proibidas. Para realizar o estudo das propriedades termodinâmicas provenientes deste tipo de banho, temos que deduzir uma expressão para a equação de Lindblad. Note que a interação é do tipo $v = g(AL^\dagger + LA^\dagger)$. Este procedimento é facilmente feito usando as equações (2.12) e (2.13) nos fornecendo:

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H_S, \rho_S] + (\gamma_L^- + \gamma_L^+) (\sigma_1^x \rho_S \sigma_1^x - \rho_S) + (\gamma_R^- + \gamma_R^+) (\sigma_N^x \rho_S \sigma_N^x - \rho_S) . \quad (\text{A.73})$$

Note que agora estamos estudando os operadores na base de σ_x , portanto temos que reescrever:

$$|+\rangle_x = \frac{|+\rangle + |-\rangle}{\sqrt{2}} \quad (\text{A.74})$$

$$|-\rangle_x = \frac{|+\rangle - |-\rangle}{\sqrt{2}} .$$

Fazendo a associação inversa, obtemos:

$$|+\rangle = \frac{|+\rangle_x + |-\rangle_x}{\sqrt{2}} \quad (\text{A.75})$$

$$|-\rangle = \frac{|+\rangle_x - |-\rangle_x}{\sqrt{2}}$$

Os autoestados do Hamiltoniano ficam escritos como:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{|++\rangle_x - |+-\rangle_x - | -+\rangle_x + |--\rangle_x}{2} \\ |2\rangle &= \frac{|++\rangle_x + |+-\rangle_x - | -+\rangle_x - |--\rangle_x}{2} \\ |3\rangle &= \frac{|++\rangle_x - |+-\rangle_x + | -+\rangle_x - |--\rangle_x}{2} \\ |4\rangle &= \frac{|++\rangle_x + |+-\rangle_x + | -+\rangle_x + |--\rangle_x}{2} . \end{aligned} \quad (\text{A.76})$$

- Para o reservatório acoplado ao lado esquerdo

Através da Equação de Lindblad (A.73), temos:

$$\begin{aligned}
 \sigma_1^x |1\rangle &= |3\rangle \\
 \sigma_1^x |2\rangle &= |4\rangle \\
 \sigma_1^x |3\rangle &= |1\rangle \\
 \sigma_1^x |4\rangle &= |2\rangle
 \end{aligned} \quad . \quad (\text{A.77})$$

Comparando a expressão da equação de Lindblad e a sua forma geral, vemos que para o anti comutador temos o operador identidade obtido através de $(\sigma_1^x)^2 = \mathcal{I}$. Portanto temos:

$$\mathcal{I}|1\rangle = |1\rangle \quad \mathcal{I}|2\rangle = |2\rangle \quad \mathcal{I}|3\rangle = |3\rangle \quad \mathcal{I}|4\rangle = |4\rangle \quad . \quad (\text{A.78})$$

- Para o reservatório acoplado ao lado direito R

Através da Equação de Lindblad (A.73), temos:

$$\begin{aligned}
 \sigma_2^x |1\rangle &= |2\rangle \\
 \sigma_2^x |2\rangle &= |1\rangle \\
 \sigma_2^x |3\rangle &= |4\rangle \\
 \sigma_2^x |4\rangle &= |3\rangle
 \end{aligned} \quad . \quad (\text{A.79})$$

Novamente temos a presença do operador identidade, obtido agora com o operador σ_2^x referente ao banho do lado direito:

$$\mathcal{I}|1\rangle = |1\rangle \quad \mathcal{I}|2\rangle = |2\rangle \quad \mathcal{I}|3\rangle = |3\rangle \quad \mathcal{I}|4\rangle = |4\rangle \quad . \quad (\text{A.80})$$

Reagrupando os resultados, podemos escrever um sistema linear envolvendo as componentes da matriz densidade:

$$\begin{aligned}
 0 &= -(\alpha_L + \alpha_R)\rho_{11} + \alpha_R\rho_{22} + \alpha_L\rho_{33} + 0 \\
 0 &= \alpha_R\rho_{11} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{22} + 0 + \alpha_L\rho_{44} \\
 0 &= \alpha_L\rho_{11} + 0 - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{33} + \alpha_R\rho_{44} \\
 0 &= 0 + \alpha_L\rho_{22} + \alpha_R\rho_{33} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{44} ,
 \end{aligned} \tag{A.81}$$

onde $\alpha_{L(R)} = \gamma_{L(R)}^- + \gamma_{L(R)}^+$.

Este sistema de equações é mais simples de ser solucionado, observando que ao somar a segunda com a terceira equação, obtemos:

$$\rho_{11} + \rho_{44} = \rho_{22} + \rho_{33} . \tag{A.82}$$

Isolando ρ_{44} da quarta equação, obtemos

$$\rho_{44} = \frac{\alpha_L\rho_{22} + \alpha_R\rho_{33}}{\alpha_L + \alpha_R} . \tag{A.83}$$

Multiplicando a segunda equação por $(\alpha_L + \alpha_R)$, a primeira por α_R e substituindo o resultado em (A.83), resulta em

$$\rho_{22} = \rho_{33} . \tag{A.84}$$

Substituindo (A.84) e (A.83) em (A.82) obtemos o restante dos valores da matriz densidade, são eles:

$$\rho_{11} = \rho_{22} = \rho_{33} = \rho_{44} . \tag{A.85}$$

Ora, vemos que através da propriedade do traço unitário da matriz densidade, o único valor possível para as componentes é $1/4$. Portanto temos a seguinte matriz densidade no estado estacionário de não-equilíbrio:

$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} . \tag{A.86}$$

O próximo passo agora consistem em calcular a corrente de calor que flui pelo sistema. Para isso utilizaremos a equação geral obtida através do *R.I.P*:

$$\dot{Q}_i = -Tr \left\{ \left(v_i H_i v_i - \frac{1}{2} \{ v_i^2, H_i \} \right) \rho_S \otimes \omega_{\beta_i} \right\} . \tag{A.87}$$

Neste modelo microscópico temos a interação *spin-bóson* representada por:

$$v_L = g_L \sigma_L^x (a_L^\dagger + a_L) , \tag{A.88}$$

e o Hamiltoniano do reservatório é:

$$H_L = \omega a_L^\dagger a_L \quad . \quad (\text{A.89})$$

Prosseguindo com o cálculo, temos:

$$\dot{Q}_L = \frac{1}{2} \langle [v_L, [v_L, H_L]] \rangle \quad (\text{A.90})$$

$$\begin{aligned} \dot{Q}_L &= \frac{1}{2} \langle [g_L \sigma_L^x (a_L^\dagger + a_L), g_L \omega_L \sigma_1^x (a_L^\dagger a_L^\dagger a_L + a_L a_L^\dagger a_L) - g_L \omega_L \sigma_L^x (a_L^\dagger a_L a_L^\dagger + a_L^\dagger a_L a_L)] \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle [g_L \sigma_L^x (a_L^\dagger + a_L), g_L \omega_L \sigma_1^x a_L^\dagger (a_L^\dagger a_L - a_L a_L^\dagger) + g_L \omega_L \sigma_L^x (a_L a_L^\dagger - a_L^\dagger a_L) a_L] \rangle \quad . \end{aligned}$$

Usando as propriedades de comutação dos operadores de criação e destruição, $[a, a^\dagger] = 1$ temos:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_L &= \frac{1}{2} \langle [g_L \sigma_L^x (a_L^\dagger + a_L), g_L \omega_L \sigma_1^x (a_L - a_L^\dagger)] \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle g_L^2 \omega_L (a_L^\dagger + a_L)(a_L - a_L^\dagger) - g_L^2 \omega_L (a_L - a_L^\dagger)(a_L^\dagger + a_L) \rangle \quad (\text{A.91}) \\ &= \frac{1}{2} \langle g_L^2 \omega_L (a_L^\dagger a_L - a_L^\dagger a_L^\dagger + a_L a_L - a_L a_L^\dagger - a_L a_L^\dagger - a_L a_L + a_L^\dagger a_L^\dagger + a_L^\dagger a_L) \rangle \quad . \end{aligned}$$

Simplificando os resultados, obtemos:

$$\dot{Q}_L = -g_L^2 \omega \quad . \quad (\text{A.92})$$

Note que o sistema apresenta um fluxo de calor intrínseco para este modelo microscópico, pois a expressão para a corrente de calor não apresenta valores esperados para operadores do sistema, que no nosso caso é dado pelo operador de spin σ_x .

Vamos calcular a corrente de trabalho. Pela expressão geral obtida em (2.25) temos os seguintes resultados:

$$\dot{W}_L = -\frac{1}{2} \langle [v_L, [v_L, H_L + H_S]] \rangle \quad , \quad (\text{A.93})$$

onde H_S e H_L são os Hamiltonianos do sistema e do banho respectivamente.

Abrindo o comutador presente em (A.29), temos:

$$\dot{W}_L = -\frac{1}{2} (\langle [v_L, [v_L, H_L]] \rangle + \langle [v_L, [v_L, H_S]] \rangle) \quad (\text{A.94})$$

$$\dot{W}_L = -\dot{Q}_L - \frac{1}{2} \langle [v_L, [v_L, H_S]] \rangle \quad .$$

Vemos que para descobrir o valor do trabalho temos que calcular o valor do segundo termo em (A.95). Seguindo o procedimento, temos:

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{2} \langle [v_L, [v_L, H_S]] \rangle &= -\frac{1}{2} \langle [g_L \sigma_1^x (a_L^\dagger + a_L), g_L \sigma_1^x (a_L^\dagger + a_L) (h'_1 \sigma_1^z + h'_2 \sigma_2^z + \Delta'_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z) \\
 &\quad - g_L \sigma_1^x (h'_1 \sigma_1^z + h'_2 \sigma_2^z + \Delta'_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z) (a_L^\dagger + a_L)] \rangle \\
 &= -\frac{1}{2} \langle [g_L \sigma_1^x (a_L^\dagger + a_L), g_L a_L^\dagger \sigma_1^x \sigma_1^z h'_1 + g_L h'_2 a_L^\dagger \sigma_1^x \sigma_2^z + g_L \Delta'_{1,2} a_L^\dagger \sigma_1^x \sigma_1^z \sigma_2^z \\
 &\quad + g_L a_L \sigma_1^x \sigma_1^z h'_1 + g_L h'_2 a_L \sigma_1^x \sigma_2^z + g_L \Delta'_{1,2} a_L \sigma_1^x \sigma_1^z \sigma_2^z \\
 &\quad - g_L a_L^\dagger \sigma_1^z \sigma_1^x h'_1 - g_L h'_2 a_L^\dagger \sigma_2^z \sigma_1^x - g_L \Delta'_{1,2} a_L^\dagger \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_1^x \\
 &\quad - g_L a_L \sigma_1^z \sigma_1^x h'_1 - g_L h'_2 a_L \sigma_2^z \sigma_1^x - g_L \Delta'_{1,2} a_L \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_1^x] \rangle .
 \end{aligned}$$

Reagrupando os termos e aplicando a volta das constantes $h' \rightarrow h/2$, obtemos a expressão para a corrente de trabalho:

$$\boxed{\dot{W}_L = g_L^2 \omega - 2g_L^2 h_1 (2\eta_L + 1) Tr^S \{ \sigma_1^z \rho_S \} - 2g_L^2 \Delta_{1,2} (2\eta_L + 1) Tr^S \{ \sigma_1^z \sigma_2^z \rho_S \}} \quad . \quad (\text{A.95})$$

Necessitamos calcular os valores esperados presentes em (A.96) para obter o valor final para \dot{W}_L . Ao escrevermos σ_z na base dos auto estados do Hamiltoniano, temos:

$$\sigma_1^z = \text{diag}(-1, -1, +1, +1) \quad (\text{A.96})$$

$$Tr \{ \sigma_1^z \rho_S \} = Tr \left\{ \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \right\} \quad (\text{A.97})$$

$$\boxed{Tr \{ \sigma_1^z \rho_S \} = 0} \quad . \quad (\text{A.98})$$

Avaliando o termo $\sigma_1^z \sigma_2^z$:

$$Tr \{ \sigma_1^z \sigma_2^z \rho_S \} = Tr \left\{ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \right\} \quad (\text{A.99})$$

$$\boxed{Tr\{\sigma_1^z \sigma_2^z \rho_S\} = 0} \quad . \quad (\text{A.100})$$

Para o ultimo termo envolvendo o ultimo spin, temos:

$$Tr\{\sigma_2^z \rho_S\} = Tr \left\{ \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \right\} \quad (\text{A.101})$$

$$\boxed{Tr\{\sigma_2^z \rho_S\} = 0} \quad . \quad (\text{A.102})$$

Deste modo, reunindo os resultados, encontramos os valores para as correntes:

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{Q}_L &= -g_L^2 \omega \\ \dot{W}_L &= g_L^2 \omega \end{aligned}} \quad . \quad (\text{A.103})$$

De modo análogo, podemos calcular o valor para \dot{Q}_R e \dot{W}_R , os valores encontrado são dados por:

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{Q}_R &= -g_R^2 \omega \\ \dot{W}_R &= g_R^2 \omega \end{aligned}} \quad . \quad (\text{A.104})$$

Sendo assim, concluímos que o modelo microscópico dada por um reservatório bosônico e o modelo de Ising possui correntes de calor e trabalho diferentes de zero e um fluxo nulo de energia ($\dot{E}_L = \dot{Q}_L + \dot{W}_L$).

Observando o procedimento analítico realizado para $N = 2$, vamos calcular primeiramente os valores das correntes para o sistema composto de 3 spins. Podemos prosseguir com o cálculo notando a seguinte observação sobre o Hamiltoniano do sistema:

$$H_S = h'_1 \sigma_1^z + h'_2 \sigma_2^z + h'_3 \sigma_3^z + \Delta'_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z + \Delta'_{2,3} \sigma_2^z \sigma_3^z + \Delta'_{1,3} \sigma_1^z \sigma_3^z \quad (\text{A.105})$$

$$H_S = H_{S'} + H \quad ,$$

onde

$$H_{S'} = h'_1 \sigma_1^z + h'_2 \sigma_2^z + \Delta'_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z \quad (\text{A.106})$$

$$H = h'_3 \sigma_3^z + \Delta'_{2,3} \sigma_2^z \sigma_3^z + \Delta'_{1,3} \sigma_1^z \sigma_3^z \quad .$$

Notamos que a expressão para a corrente de calor envolve apenas componentes do reservatório, portanto já obtemos o resultado dado por (A.92). Para a corrente de trabalho, temos:

$$\dot{W}_L^{N=3} = -\frac{1}{2} \langle [v_L, [v_L, H_L]] \rangle - \frac{1}{2} \langle [v_L, [v_L, H_{S'}]] \rangle - \frac{1}{2} \langle [v_L, [v_L, H]] \rangle \quad (\text{A.107})$$

$$\dot{W}_L^{N=3} = -\dot{Q}_L + \dot{W}_L^{N=2} - \frac{1}{2} \langle [v_L, [v_L, H]] \rangle \quad .$$

Vemos que precisamos calcular o valor esperado para o novo termo presente em (A.108). Temos:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \langle [v_L, [v_L, H]] \rangle &= -\frac{1}{2} \left\langle [g_L \sigma_1^x (a_L^\dagger + a_L), g_L \sigma_1^x (a_L^\dagger + a_L) (h'_3 \sigma_1^z + \Delta'_{2,3} \sigma_2^z \sigma_3^z + \Delta'_{1,3} \sigma_1^z \sigma_3^z) \right. \\ &\quad \left. - g_L \sigma_1^x (h'_3 \sigma_1^z + \Delta'_{2,3} \sigma_2^z \sigma_3^z + \Delta'_{1,3} \sigma_1^z \sigma_3^z) (a_L^\dagger + a_L) \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2} \left\langle g_L^2 (a_L^\dagger a_L + a_L a_L^\dagger) (h'_3 \sigma_1^z + \Delta'_{2,3} \sigma_2^z \sigma_3^z) + \Delta'_{1,3} \sigma_1^z \sigma_3^z \right. \\ &\quad \left. - g_L^2 (a_L^\dagger a_L + a_L a_L^\dagger) (h'_3 \sigma_1^z + \Delta'_{2,3} \sigma_2^z \sigma_3^z + \Delta'_{1,3} \sigma_1^z \sigma_3^z) \right. \\ &\quad \left. - g_L^2 (a_L^\dagger a_L + a_L a_L^\dagger) (h'_3 \sigma_1^z + \Delta'_{2,3} \sigma_2^z \sigma_3^z + \Delta'_{1,3} \sigma_1^z \sigma_3^z) \right. \\ &\quad \left. + g_L^2 (a_L^\dagger a_L + a_L a_L^\dagger) (h'_3 \sigma_1^z + \Delta'_{2,3} \sigma_2^z \sigma_3^z) + \Delta'_{1,3} \sigma_1^z \sigma_3^z \right\rangle \quad , \end{aligned} \quad (\text{A.108})$$

esta expressão nos fornece o resultado final:

$$-\frac{1}{2} \langle [v_L, [v_L, H]] \rangle = -2g_L^2 \Delta'_{1,3} (2\eta_L + 1) Tr^S \{ \sigma_1^z \sigma_3^z \} . \quad (\text{A.109})$$

Fazendo novamente que $h' \rightarrow h/2$, obtemos:

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{W}_L^{N=3} &= g_L^2 \omega - 2g_L^2 h_1 (2\eta_L + 1) Tr^S \{ \sigma_1^z \rho_S \} \\ &\quad - 2g_L^2 \Delta_{1,2} (2\eta_L + 1) Tr^S \{ \sigma_1^z \sigma_2^z \rho_S \} - 2g_L^2 (2\eta_L + 1) \Delta_{1,3} Tr^S \{ \sigma_1^z \sigma_3^z \} \end{aligned}} \quad . \quad (\text{A.110})$$

Vamos agora calcular o estado estacionário de não equilíbrio para computar os valores das correntes. Assim como anteriormente, consideraremos um *NESS* na forma

diagonal:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |---\rangle & |2\rangle &= |--+\rangle \\
 |3\rangle &= |-+-\rangle & |4\rangle &= |-++\rangle \\
 |5\rangle &= |+--\rangle & |6\rangle &= |+-+\rangle \\
 |7\rangle &= |++-\rangle & |8\rangle &= |+++ \rangle
 \end{aligned} \tag{A.111}$$

Podemos reescrever os dissipadores da seguinte maneira:

$$D_L(\rho) = \alpha_L(\sigma_1^x \rho \sigma_1^x - \rho) \tag{A.112}$$

$$D_R(\rho) = \alpha_R(\sigma_3^x \rho \sigma_3^x - \rho) \ .$$

onde $\alpha_{L(R)} = \gamma_{L(R)}^+ + \gamma_{L(R)}^-$, $\gamma_{L(R)}^- = g_{L(R)}^2(1 + \eta_{L(R)})$ e $\gamma_{L(R)}^+ = g_{L(R)}^2 \eta_{L(R)}$. Calculando as componentes da matriz densidade, temos para o *spin* acoplado ao lado esquerdo:

$$\begin{aligned}
 \sigma_1^x |1\rangle &= |5\rangle & \sigma_1^x |2\rangle &= |6\rangle \\
 \sigma_1^x |3\rangle &= |7\rangle & \sigma_1^x |4\rangle &= |8\rangle \\
 \sigma_1^x |5\rangle &= |1\rangle & \sigma_1^x |6\rangle &= |2\rangle \\
 \sigma_1^x |7\rangle &= |3\rangle & \sigma_1^x |8\rangle &= |4\rangle \ .
 \end{aligned} \tag{A.113}$$

Para o lado esquerdo temos o operador identidade obtido através de σ_1^x , logo

$$\begin{aligned}
 \mathcal{I} |1\rangle &= |1\rangle & \mathcal{I} |2\rangle &= |2\rangle \\
 \mathcal{I} |3\rangle &= |3\rangle & \mathcal{I} |4\rangle &= |4\rangle \\
 \mathcal{I} |5\rangle &= |5\rangle & \mathcal{I} |6\rangle &= |6\rangle \\
 \mathcal{I} |7\rangle &= |7\rangle & \mathcal{I} |8\rangle &= |8\rangle \ .
 \end{aligned} \tag{A.114}$$

Referente ao operador σ_3^x que representa o *spin* acoplado ao banho do lado direito, temos:

$$\begin{aligned}
 \sigma_3^x |1\rangle &= |2\rangle & \sigma_3^x |2\rangle &= |1\rangle \\
 \sigma_3^x |3\rangle &= |4\rangle & \sigma_3^x |4\rangle &= |3\rangle \\
 \sigma_3^x |5\rangle &= |6\rangle & \sigma_3^x |6\rangle &= |5\rangle \\
 \sigma_3^x |7\rangle &= |8\rangle & \sigma_3^x |8\rangle &= |7\rangle \quad .
 \end{aligned} \tag{A.115}$$

Novamente para o lado direito temos o operador identidade obtido através de σ_1^x , logo

$$\begin{aligned}
 \mathcal{I} |1\rangle &= |1\rangle & \mathcal{I} |2\rangle &= |2\rangle \\
 \mathcal{I} |3\rangle &= |3\rangle & \mathcal{I} |4\rangle &= |4\rangle \\
 \mathcal{I} |5\rangle &= |5\rangle & \mathcal{I} |6\rangle &= |6\rangle \\
 \mathcal{I} |7\rangle &= |7\rangle & \mathcal{I} |8\rangle &= |8\rangle \quad .
 \end{aligned} \tag{A.116}$$

Reunindo os resultados, conseguimos montar dois grupos de equações:

- *Grupo I para as componentes 1, 2, 5 e 6*

$$\begin{aligned}
 0 &= -(\alpha_L + \alpha_R)\rho_{11} + \alpha_R\rho_{22} + \alpha_L\rho_{55} + 0 \\
 0 &= \alpha_R\rho_{11} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{22} + 0 + \alpha_L\rho_{66} \\
 0 &= \alpha_L\rho_{11} + 0 - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{55} + \alpha_R\rho_{66} \\
 0 &= 0 + \alpha_L\rho_{22} + \alpha_R\rho_{55} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{66} \quad .
 \end{aligned} \tag{A.117}$$

- *Grupo II para as componentes 3, 4, 7 e 8*

$$\begin{aligned}
 0 &= -(\alpha_L + \alpha_R)\rho_{33} + \alpha_R\rho_{44} + \alpha_L\rho_{77} + 0 \\
 0 &= \alpha_R\rho_{33} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{44} + 0 + \alpha_L\rho_{88} \\
 0 &= \alpha_L\rho_{33} + 0 - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{77} + \alpha_R\rho_{88} \\
 0 &= 0 + \alpha_L\rho_{44} + \alpha_R\rho_{77} - (\alpha_L + \alpha_R)\rho_{88} \quad .
 \end{aligned} \tag{A.118}$$

Este sistema já foi solucionado para o caso $N = 2$, basta fazer a correspondência com os índices da matriz densidade:

$$\rho_{11} = \rho_{22} = \rho_{55} = \rho_{66} = \rho_I \quad (A.119)$$

$$\rho_{33} = \rho_{44} = \rho_{77} = \rho_{88} = \rho_{II} \quad .$$

Através da quinta equação que a matriz densidade satisfaz, obtemos:

$$\rho_I = a\rho$$

$$\rho_{II} = b\rho$$

$$(A.120)$$

$$4a\rho + 4b\rho = 1$$

$$\rho = \frac{1}{4(a+b)} \quad ,$$

onde a e b são constantes positivas. Logo concluímos que a matriz densidade no *NESS* é dada por:

$$\rho = \begin{bmatrix} \rho_I & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_I & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{II} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{II} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{II} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{II} \end{bmatrix} \quad ,$$

onde

$$\rho_I = \frac{a}{4(a+b)}$$

$$(A.121)$$

$$\rho_{II} = \frac{b}{4(a+b)} \quad .$$

Por fim, através de (A.55), (A.58), (A.61), (A.64) e (A.67) concluímos os valores para as correntes:

$$\boxed{\begin{matrix} \dot{Q}_L = -g_L^2 \omega \\ \dot{W}_L = g_L^2 \omega \end{matrix}} \quad . \quad (A.122)$$

E de modo análogo, temos os valores para \dot{Q}_R e \dot{W}_R :

$$\begin{array}{l} \dot{Q}_R = -g_R^2 \omega \\ \dot{W}_R = g_R^2 \omega \end{array} . \quad (\text{A.123})$$

Portanto, vemos que o modelo de Ising acoplado a reservatórios bosônicos apresenta correntes de calor e trabalho diferentes de zero, mas uma corrente nula de energia ($\dot{E}_L = \dot{Q}_L + \dot{W}_L$) para qualquer que seja o estado estacionário de não-equilíbrio na forma diagonal, satisfazendo a (A.122).

APÊNDICE B – Procedimentos Analíticos para a Cadeia XX

Neste apêndice, vamos resolver os cálculos envolvendo as correntes derivadas no capítulo 3 do modelo XX . Vimos que a expressão para a corrente de energia é dada por

$$J = \gamma \sum_k \epsilon_k \frac{g_{L,k} \chi_{L,k} g_{R,k} \chi_{R,k}}{g_{L,k} \chi_{L,k} + g_{R,k} \chi_{R,k}} [f_{L,k} - f_{R,k}] \quad . \quad (\text{B.1})$$

Quando estudamos o limite de alto gradiente de temperatura, as funções $f_{L(R),k}$ e $\chi_{L(R),k}$ assumem os seguintes comportamentos:

$$\begin{aligned} f_{L,k} &= \frac{1}{e^{\epsilon_k/T_L} + 1} \rightarrow \frac{1}{2} \\ f_{R,k} &= \frac{1}{e^{\epsilon_k/T_R} + 1} \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

$$\begin{aligned} \chi_{L,k} &= \coth\left(\frac{|\epsilon_k|}{2T_L}\right) \rightarrow \infty \\ \chi_{R,k} &= \coth\left(\frac{|\epsilon_k|}{2T_R}\right) \rightarrow 1 \quad , \end{aligned}$$

de modo que a corrente assume a forma simplificada

$$J = \frac{\gamma}{2} \sum_{k=1}^N \epsilon_k g_{R,k} \quad . \quad (\text{B.3})$$

Primeiramente, estudaremos o caso do espectro estritamente positivo, ou seja, $h > 0$ e $h > 2\delta$. Com o processo de diagonalização do Hamiltoniano realizado em [58], temos os valores de $g_{L(R),k} = \left(S_{1(N),k}^{-1}\right)^2$

$$g_{L,k} = \frac{2}{N} \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \quad (\text{B.4})$$

$$g_{R,k} = \frac{2}{N} \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right]$$

e os autovalores dados por

$$\epsilon_k = h + 2\delta \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \quad , \quad (\text{B.5})$$

logo, temos que calcular a soma

$$J = \frac{\gamma}{N} \sum_{k=1}^N \left(h + 2\delta \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \right) \left(\cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \right) . \quad (\text{B.6})$$

Separando cada uma delas, encontramos:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] &= \sum_{k=1}^N \left(\frac{e^{i\pi(2k-1)/4N} + e^{-i\pi(2k-1)/4N}}{2} \right)^2 \\ &= \sum_{k=1}^N \left[\frac{e^{i\pi(2k-1)/2N} + e^{-i\pi(2k-1)/2N} + 2}{4} \right] \\ &= \frac{1}{4} \left[\sum_{k=1}^N 2 + \sum_{k=1}^N e^{i\pi(2k-1)/2N} + \sum_{k=1}^N e^{-i\pi(2k-1)/2N} \right] . \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Note que temos somas geométricas:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N e^{i\pi(2k-1)/2N} &= e^{-i\pi/2N} \sum_{k=1}^N \left(e^{i\pi/N} \right)^k \\ &= e^{-i\pi/2N} e^{i\pi/N} \frac{(e^{i\pi} - 1)}{e^{i\pi/N} - 1} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

$$\sum_{k=1}^N e^{i\pi(2k-1)/2N} = -2 \left(e^{i\pi/2N} - e^{-i\pi/2N} \right)^{-1}$$

e para a segunda soma, encontramos

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N e^{-i\pi(2k-1)/2N} &= e^{i\pi/2N} \sum_{k=1}^N \left(e^{-i\pi/N} \right)^k \\ &= e^{i\pi/2N} e^{-i\pi/N} \frac{(e^{i\pi} - 1)}{e^{i\pi/N} - 1} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

$$\sum_{k=1}^N e^{i\pi(2k-1)/2N} = 2 \left(e^{i\pi/2N} - e^{-i\pi/2N} \right)^{-1} .$$

Logo concluímos que

$$h \sum_{k=1}^N \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] = \frac{hN}{2} . \quad (\text{B.10})$$

Vamos avaliar o somatório

$$\sum_{k=1}^N \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] =$$

$$\sum_{k=1}^N \left(\frac{e^{i\pi(2k-1)/2N} + e^{-i\pi(2k-1)/2N}}{2} \right) \left(\frac{e^{i\pi(2k-1)/4N} + e^{-i\pi(2k-1)/4N}}{2} \right)^2 \quad (\text{B.11})$$

Resolvendo os produtos acima, obtemos

$$= \frac{1}{8} \sum_{k=1}^N \left(2 + e^{-i\pi(2k-1)/N} + e^{i\pi(2k-1)/N} + 2e^{-i\pi(2k-1)/2N} + 2e^{i\pi(2k-1)/2N} \right) \quad (\text{B.12})$$

Note que as somas são dadas por

$$\sum_{k=1}^N e^{i\pi(2k-1)/N} = e^{-i\pi/N} \sum_{k=1}^N \left(e^{i2\pi/N} \right)^k$$

$$= e^{-i\pi/N} e^{i2\pi/N} \frac{(e^{i2\pi} - 1)}{e^{i2\pi/N} - 1} = 0 \quad (\text{B.13})$$

e por fim, temos

$$\sum_{k=1}^N e^{-i\pi(2k-1)/N} = e^{i\pi/N} \sum_{k=1}^N \left(e^{-i2\pi/N} \right)^k$$

$$= e^{i\pi/N} e^{-i2\pi/N} \frac{(e^{-i2\pi} - 1)}{e^{-i2\pi/N} - 1} = 0 \quad (\text{B.14})$$

Sendo assim, unindo os resultados apresentados em (B.7) a (B.14), concluímos que para o espectro estritamente positivo temos o seguinte fluxo de calor

$$J = \frac{\gamma}{2}(h + \delta) \quad (\text{B.15})$$

Para o fluxo com os banhos invertidos, temos que

$$J_r = -\frac{\gamma}{2} \sum_{k=1}^N \epsilon_k g_{L,k} \quad (\text{B.16})$$

segundo as contas:

$$J_r = -\frac{\gamma}{N} \sum_{k=1}^N \left(h + 2\delta \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \right) \left(\sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \right) . \quad (\text{B.17})$$

Separando cada uma delas, encontramos:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] &= \sum_{k=1}^N \left(\frac{e^{i\pi(2k-1)/4N} - e^{-i\pi(2k-1)/4N}}{2i} \right)^2 \\ &= \sum_{k=1}^N \left[\frac{e^{i\pi(2k-1)/2N} + e^{-i\pi(2k-1)/2N} - 2}{-4} \right] \\ &= \frac{1}{-4} \left[\sum_{k=1}^N (-2) + \sum_{k=1}^N e^{i\pi(2k-1)/2N} + \sum_{k=1}^N e^{-i\pi(2k-1)/2N} \right] \\ &= \frac{N}{2} \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Avaliando o segundo somatório

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] &= \\ &= \sum_{k=1}^N \left(\frac{e^{i\pi(2k-1)/2N} + e^{-i\pi(2k-1)/2N}}{2} \right) \left(\frac{e^{i\pi(2k-1)/4N} - e^{-i\pi(2k-1)/4N}}{2i} \right)^2 \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Resolvendo os produtos acima, obtemos

$$= \frac{1}{-8} \sum_{k=1}^N \left(2 + e^{i\pi(2k-1)/N} + e^{-i\pi(2k-1)/N} - 2e^{-i\pi(2k-1)/2N} - 2e^{-i\pi(2k-1)/2N} \right) , \quad (\text{B.20})$$

onde concluímos, através dos cálculos anteriores, que

$$\sum_{k=1}^N \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] = \frac{-N}{4} \quad (\text{B.21})$$

Sendo assim, unindo os resultados apresentados acima, concluímos que para o espectro estritamente positivo temos o seguinte fluxo de calor com os banhos invertidos

$$J = -\frac{\gamma}{2}(h - \delta) . \quad (\text{B.22})$$

Prosseguiremos o cálculo para o espectro estritamente negativo, ou seja, $h < 0$ e $|h| > 2\delta$. Desta forma, no limite de $T_L \rightarrow \infty$ e $T_R \rightarrow 0$ temos o seguinte comportamento para a distribuição de Fermi-Dirac:

$$\begin{aligned} (f_{L,k} - f_{R,k}) &= \frac{1}{e^{\beta_{L(R)}\epsilon_k} + 1} - \frac{1}{e^{\beta_R\epsilon_k} + 1} \\ &\rightarrow \frac{1}{2} - 1 \rightarrow -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

Logo, a corrente de energia assume a seguinte expressão:

$$J = -\frac{\gamma}{2} \sum_{k=1}^N \epsilon_k g_{R,k} \quad . \quad (\text{B.23})$$

Com os resultados apresentados anteriormente, é fácil ver que o valor para a corrente com o espectro estritamente negativo é dado por

$$J = -\frac{\gamma}{2}(h + \delta) \quad , \quad (\text{B.24})$$

ou seja,

$$J = \frac{\gamma}{2}(|h| - \delta) \quad . \quad (\text{B.25})$$

Para os banhos invertidos, temos $T_L \rightarrow 0$ e $T_R \rightarrow \infty$, logo

$$\begin{aligned} (f_{L,k} - f_{R,k}) &= \frac{1}{e^{\beta_{L(R)}\epsilon_k} + 1} - \frac{1}{e^{\beta_R\epsilon_k} + 1} \\ &\rightarrow 1 - \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2} \end{aligned}$$

e a corrente assume a expressão

$$J_r = \frac{\gamma}{2} \sum_{k=1}^N \epsilon_k g_{L,k} \quad . \quad (\text{B.26})$$

Por fim, através das contas anteriores, a corrente com os banhos invertidos assume o valor final

$$J = -\frac{\gamma}{2}(|h| + \delta) \quad . \quad (\text{B.27})$$

Estudaremos agora o regime de forte interação entre os spins. Através da diagonalização do Hamiltoniano, temos os autovalores dados por (B.5). Considerando um número par de spins, temos que para $k \in [1, \dots, N/2]$ o cosseno assume valores positivos

$$\cos(\pi/2N), \dots, \cos\left[\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2N}\right]$$

e para $k \in [N/2 + 1, \dots, N]$ assume valores negativos. Dessa maneira, temos uma condição para os autovalores assumirem valores estritamente negativos para $k \geq N/2 + 1$ a qual impõe restrição mínima para o valor da interação entre os spins. Note que para $k \geq N/2 + 1$

$$\begin{aligned} h + 2\delta \cos\left[\frac{(N+1)\pi}{2N}\right] &< 0 \\ 2\delta \left| \cos\left[\frac{(N+1)\pi}{2N}\right] \right| &> h \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

$$\delta > \frac{h}{2} \left| \sec\left[\frac{(N+1)\pi}{2N}\right] \right| .$$

Neste regime de interação, o espectro fica dividido igualmente em valores positivos e negativos de energia. Deste modo, podemos analisar a corrente de calor:

$$J = \gamma \sum_{k=1}^{N/2} \epsilon_k \frac{g_{L,k} \chi_{R,k} g_{R,k} \chi_{L,k}}{g_{L,k} \chi_{R,k} + g_{R,k} \chi_{L,k}} [f_{L,k} - f_{R,k}] + \gamma \sum_{k=N/2+1}^N \epsilon_k \frac{g_{L,k} \chi_{R,k} g_{R,k} \chi_{L,k}}{g_{L,k} \chi_{R,k} + g_{R,k} \chi_{L,k}} [f_{L,k} - f_{R,k}] , \quad (\text{B.29})$$

onde no segundo termo temos $\epsilon_k < 0$. Logo, quando $T_L \rightarrow \infty$ e $T_R \rightarrow 0$ temos

$$\begin{aligned} (f_{L,k} - f_{R,k}) &= \frac{1}{e^{\beta_L \epsilon_k} + 1} - \frac{1}{e^{\beta_R \epsilon_k} + 1} \\ &\rightarrow \frac{1}{2} - 1 \rightarrow -\frac{1}{2} . \end{aligned}$$

Para $\epsilon_k > 0$ temos

$$\begin{aligned} (f_{L,k} - f_{R,k}) &= \frac{1}{e^{\beta_L \epsilon_k} + 1} - \frac{1}{e^{\beta_R \epsilon_k} + 1} \\ &\rightarrow \frac{1}{2} - 0 \rightarrow \frac{1}{2} . \end{aligned}$$

Sendo assim, podemos escrever

$$J = \frac{\gamma}{2} \sum_{k=1}^{N/2} \epsilon_k g_{R,k} - \frac{\gamma}{2} \sum_{k=N/2+1}^N \epsilon_k g_{R,k} = J_1 + J_2 . \quad (\text{B.30})$$

- Cálculo da primeira soma

$$\begin{aligned}
 \sum_{k=1}^{N/2} \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] &= \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{N/2} \left(e^{i(2k-1)\pi/2N} + e^{-i(2k-1)\pi/2N} + 2 \right) \\
 &= \frac{1}{4} \left[N + e^{-i\pi/2N} \sum_{k=1}^{N/2} e^{ik\pi/N} + e^{i\pi/2N} \sum_{k=1}^{N/2} e^{-ik\pi/N} \right] \\
 &= \frac{1}{4} \left[N + \frac{e^{-i\pi/2N} e^{i\pi/N} (e^{i\pi/2} - 1)}{e^{i\pi/2N} (e^{i\pi/2N} - e^{-i\pi/2N})} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{e^{i\pi/2N} e^{-i\pi/N} (e^{-i\pi/2} - 1)}{e^{-i\pi/2N} (e^{-i\pi/2N} - e^{i\pi/2N})} \right] \\
 &= \frac{1}{4} \left[N + \frac{2i}{e^{i\pi/2N} - e^{-i\pi/2N}} \right]
 \end{aligned} \tag{B.31}$$

$$\sum_{k=1}^{N/2} \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] = \frac{1}{4} \left[N + \operatorname{csc} \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right]$$

Realizando o procedimento para a segunda parte,

$$\begin{aligned}
 \sum_{k=1}^{N/2} \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] &= \frac{1}{8} \sum_{K=1}^{N/2} \left[\left(e^{i(2k-1)\pi/2N} + e^{-i(2k-1)\pi/2N} + 2 \right) \times \right. \\
 &\quad \left. \times \left(e^{i(2k-1)\pi/2N} - e^{-i(2k-1)\pi/2N} \right) \right] \\
 &= \frac{1}{8} \sum_{k=1}^{N/2} \left[e^{i(2k-1)\pi/N} + 2 + e^{-i(2k-1)\pi/2N} + 2e^{i(2k-1)\pi/2N} + 2e^{-i(2k-1)\pi/2N} \right] \\
 &= \frac{1}{8} \left[N - \frac{2e^{i\pi/N}}{e^{i\pi/N} (e^{i\pi/N} - e^{-i\pi/N})} + \frac{2e^{-i\pi/N}}{e^{-i\pi/N} (e^{i\pi/N} - e^{-i\pi/N})} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{2(i-1)}{e^{i\pi/2N} - e^{-i\pi/2N}} + \frac{2(i+1)}{e^{i\pi/2N} - e^{-i\pi/2N}} \right]
 \end{aligned}$$

Logo, podemos concluir que

$$\sum_{k=1}^{N/2} \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] = \frac{1}{8} \left[N + 2 \operatorname{csc} \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right] \quad (\text{B.32})$$

$$J_1 = \frac{\gamma}{N} \left[\frac{h}{4} \left(N + \operatorname{csc} \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right) + \frac{\delta}{4} \left(N + 2 \operatorname{csc} \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right) \right] \quad (\text{B.33})$$

Realizando os cálculos para a segunda soma, obtemos:

$$J_2 = -\frac{\gamma}{N} \sum_{k=N/2+1}^N \left(h + 2\delta \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \right) \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] . \quad (\text{B.34})$$

Note que

$$\begin{aligned} \sum_{k=N/2+1}^N \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] &= \frac{1}{4} \sum_{k=N/2+1}^N \left(e^{i(2k-1)\pi/2N} + e^{-i(2k-1)\pi/2N} + 2 \right) \\ &= \frac{1}{4} \left[N + e^{-i\pi/2N} \sum_{k=N/2+1}^N e^{ik\pi/N} + e^{i\pi/2N} \sum_{k=N/2+1}^N e^{-ik\pi/N} \right] \\ &= \frac{1}{4} \left[N + \frac{e^{-i\pi/2N} e^{i(N/2+1)\pi/N} (e^{i\pi/2} - 1)}{e^{i\pi/N} - 1} + \frac{e^{i\pi/2N} e^{-i(N/2+1)\pi/N} (e^{-i\pi/2} - 1)}{e^{-i\pi/N} - 1} \right] \\ &= \frac{1}{4} \left[N - \frac{(i+1)}{e^{i\pi/2N} - e^{-i\pi/2N}} - \frac{(i-1)}{e^{i\pi/2N} - e^{-i\pi/2N}} \right] \end{aligned}$$

$$\sum_{k=N/2+1}^N \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] = \frac{1}{4} \left[N - \operatorname{csc} \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right] \quad (\text{B.35})$$

Vamos avaliar agora a segunda parte:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{k=N/2+1}^N \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] = \frac{1}{8} \sum_{k=N/2+1}^N \left[\left(e^{i(2k-1)\pi/2N} + e^{-i(2k-1)\pi/2N} + 2 \right) \times \right. \\
 & \quad \left. \times \left(e^{i(2k-1)\pi/2N} - e^{-i(2k-1)\pi/2N} \right) \right] \\
 & = \frac{1}{8} \sum_{k=N/2+1}^N \left[e^{i(2k-1)\pi/N} + 2 + e^{-i(2k-1)\pi/2N} + 2e^{i(2k-1)\pi/2N} + 2e^{-i(2k-1)\pi/2N} \right] \\
 & = \frac{1}{8} \left[N + e^{-i\pi/N} \sum_{k=N/2+1}^N e^{i2k\pi/N} + e^{i\pi/N} \sum_{k=N/2+1}^N e^{-i2k\pi/N} + \right. \\
 & \quad \left. + 2e^{-i\pi/2N} \sum_{k=N/2+1}^N e^{ik\pi/N} + 2e^{i\pi/2N} \sum_{k=N/2+1}^N e^{-ik\pi/N} \right] \\
 & = \frac{1}{8} \left[N - \frac{2}{(e^{i\pi/N} - e^{-i\pi/N})} - \frac{2}{(e^{i\pi/N} - e^{-i\pi/N})} + \right. \\
 & \quad \left. - \frac{2(i+1)}{e^{i\pi/2N} - e^{-i\pi/2N}} - \frac{2(i-1)}{e^{i\pi/2N} - e^{-i\pi/2N}} \right]
 \end{aligned}$$

Logo, concluímos que a soma é dada por

$$\sum_{k=N/2+1}^N \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] = \frac{1}{8} \left[N - 2csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right]$$

e a corrente J_2 assume o seguinte valor

$$J_2 = \frac{-\gamma}{N} \left[\frac{h}{4} \left(N - csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right) + \frac{\delta}{4} \left(N - 2csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right) \right] . \quad (\text{B.36})$$

Como $J = J_1 + J_2$, temos que

$$\boxed{J = \frac{\gamma}{N} csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \left[\frac{h}{2} + \delta \right]} . \quad (\text{B.37})$$

Para o fluxo com os banhos invertidos, o raciocínio é o mesmo apresentado anteriormente. Portanto, temos que

$$J_r = -\frac{\gamma}{2} \sum_{k=1}^{N/2} \epsilon_k g_{L,k} + \frac{\gamma}{2} \sum_{k=N/2+1}^N \epsilon_k g_{L,k} \quad . \quad (\text{B.38})$$

Separando em duas somas, temos

$$J_r = J'_1 + J'_2 \quad . \quad (\text{B.39})$$

Para a primeira, temos

$$J'_1 = -\frac{\gamma}{2} \sum_{k=1}^{N/2} \left(h + 2\delta \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \right) \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \quad (\text{B.40})$$

Note que

$$\sum_{k=1}^{N/2} \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] = -\frac{1}{4} \sum_{k=1}^{N/2} \left[-N + e^{-i\pi/2N} \sum_{k=1}^{N/2} e^{ik\pi/N} + e^{i\pi/2N} \sum_{k=1}^{N/2} e^{-ik\pi/N} \right] \quad . \quad (\text{B.41})$$

Seguindo as contas realizadas anteriormente, vemos que

$$\sum_{k=1}^{N/2} \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] = \frac{1}{4} \left[N - \csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right] \quad .$$

Para a segunda parte da primeira corrente, temos que

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{N/2} \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] &= -\frac{1}{8} \sum_{k=1}^{N/2} \left[\left(e^{i(2k-1)\pi/2N} + e^{-i(2k-1)\pi/2N} - 2 \right) \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(e^{i(2k-1)\pi/2N} - e^{-i(2k-1)\pi/2N} \right) \right] \quad . \end{aligned}$$

Comparando com os resultados anteriores, temos:

$$\sum_{k=1}^{N/2} \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] = -\frac{1}{8} \left[N - 2\csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right] \quad ,$$

logo o valor de J'_1 é dado por

$$J'_1 = -\frac{\gamma}{N} \left[\frac{h}{4} \left(N - \csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right) + \frac{\delta}{4} \left(2\csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) - N \right) \right] \quad . \quad (\text{B.42})$$

Para a segunda parte da corrente, temos que

$$J'_2 = \frac{\gamma}{2} \sum_{k=N/2+1}^N \left(h + 2\delta \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] \right) \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] . \quad (\text{B.43})$$

Onde cada parte é dada por

$$\sum_{k=N/2+1}^N \cos^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] = -\frac{1}{4} \sum_{k=N/2+1}^N \left(e^{i(2k-1)\pi/2N} + e^{-i(2k-1)\pi/2N} - 2 \right) , \quad (\text{B.44})$$

que nos fornecem, de acordo com as contas anteriores,

$$\sum_{k=N/2+1}^N \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] = \frac{1}{4} \left[N + \csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right] . \quad (\text{B.45})$$

Para a segunda parte da segunda soma, temos

$$\begin{aligned} \sum_{k=N/2+1}^N \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] &= \frac{1}{8} \sum_{k=N/2+1}^N \left[\left(e^{i(2k-1)\pi/2N} + e^{-i(2k-1)\pi/2N} - 2 \right) \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(e^{i(2k-1)\pi/2N} - e^{-i(2k-1)\pi/2N} \right) \right] \end{aligned}$$

Comparando com os resultados anteriores, temos que

$$\sum_{k=N/2+1}^N \sin^2 \left[\frac{(2k-1)\pi}{4N} \right] \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2N} \right] = -\frac{1}{8} \left[N + 2\csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right] . \quad (\text{B.46})$$

Logo, a segunda parte assume o seguinte resultado:

$$J'_2 = \frac{\gamma}{N} \left[\frac{h}{4} \left(N + \csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right) - \frac{\delta}{4} \left(N + 2\csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \right) \right] . \quad (\text{B.47})$$

Sendo assim, reunindo os resultados anteriores, podemos concluir o valor da corrente com os banhos invertidos:

$$J_r = -\frac{\gamma}{N} \left[-\frac{h}{2} + \delta \right] \csc \left(\frac{\pi}{2N} \right) \quad (\text{B.48})$$