

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

Programa de Pós-Graduação em Física

Luís Henrique Teixeira Reis

**Energia, calor e trabalho em sistemas quânticos abertos com  
dinâmica markoviana**

Belo Horizonte  
2020

Luís Henrique Teixeira Reis

**Energia, calor e trabalho em sistemas quânticos abertos com  
dinâmica markoviana**

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

Orientador: Emmanuel Araújo Pereira

Belo Horizonte  
2020

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

R375e Reis, Luís Henrique Teixeira.

Energia, calor e trabalho em sistemas quânticos abertos com dinâmica markoviana / Luís Henrique Teixeira Reis. – 2020.  
94f., enc. : il.

Orientador: Emmanuel Araújo Pereira.  
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais,  
Departamento de Física.  
Bibliografia: f. 79-81.

1. Sistemas quânticos. 2. Termodinâmica, teses. 3. Energia.  
I. Título. II. Pereira, Emmanuel Araújo. III. Universidade Federal de Minas  
Gerais, Departamento de Física.

CDU – 536(043)



Universidade Federal de Minas Gerais  
Instituto de Ciências Exatas  
Programa de Pós-Graduação em Física  
Caixa Postal 702  
30.123-970 Belo Horizonte - MG - Brasil

Telefone (xx) (31) 3499 5637  
(xx) (31) 3499 5633  
Fax (xx) (31) 3499 5688  
(xx) (31) 3499 5600  
e-mail pgfisica@fisica.ufmg.br

**ATA DA SESSÃO DE ARGUIÇÃO DA 633ª DISSERTAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA DEFENDIDA POR LUÍS HENRIQUE TEIXEIRA REIS**, orientado pelo professor Emmanuel Araújo Pereira para obtenção do grau de **MESTRE EM FÍSICA**. Às 09:00 horas de dois de março de 2020, na sala 4129 do Departamento de Física da UFMG, reuniu-se a Comissão Examinadora, composta pelos professores **Emmanuel Araújo Pereira** (Orientador - Departamento de Física/UFMG), **Lucas Alvares da Silva Mol** (Departamento de Física/UFMG) e **Humberto Cesar Fernandes Lemos** (Departamento de Estatística, Física e Matemática/UFSJ) para dar cumprimento ao Artigo 37 do Regimento Geral da UFMG, submetendo o bacharel **LUIS HENRIQUE TEIXEIRA REIS** à arguição de seu trabalho de dissertação, que recebeu o título de **“Energia, calor e trabalho em sistemas quânticos abertos com dinâmica markoviana”**. Às 14:00 horas do mesmo dia o candidato fez uma exposição oral de seu trabalho durante aproximadamente 50 minutos. Após esta, os membros da comissão prosseguiram com a sua arguição e apresentaram seus pareceres individuais sobre o trabalho, concluindo pela aprovação do candidato.

Belo Horizonte, 02 de março de 2020.

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

Prof. Lucas Alvares da Silva Mol  
Departamento de Física/UFMG

Prof. Humberto Cesar Fernandes Lemos  
Departamento de Estatística, Física e Matemática/UFSJ

Candidato

*“Eu queria ser banhado por um rio como  
um sítio é.  
Como as árvores são.  
Como as pedras são.  
Eu fosse inventado de ter uma garça e outros  
pássaros em minhas árvores.  
Eu fosse inventado como as pedrinhas e as rãs  
em minhas areias.  
Eu escorresse desembestado sobre as grotas  
e pelos cerrados como os rios.  
Sem conhecer nem os rumos como os  
andarilhos.  
Livre, livre é quem não tem rumo.”*

Manoel de Barros

# Agradecimentos

Sou grato. Grato pela minha saúde e por ter tido a oportunidade de estudar. Agradeço imensamente meus pais, minha irmã, meus irmãos e toda a minha numerosa família por terem me incentivado a trilhar este caminho que por ora finda e por terem criado condições favoráveis para que isso ocorresse. Pude aprender sobre as coisas, sobre as pessoas e, principalmente, sobre mim mesmo nesse tempo que se passou e vocês me proporcionaram isso. Obrigado.

Agradeço meu grande amigo Daniel que há anos é meu companheiro de casa. Obrigado pelas conversas, pelo companheirismo, pelos ensinamentos e pelos consolos nos momentos mais difíceis.

Agradeço ao prof. Emmanuel, meu orientador, pela disposição e empenho em me orientar. Agradeço em especial pelas longas e divertidas conversas e pelos casos que escutei repetidas vezes ao longo dos anos de graduação e durante o mestrado. Agradeço pelos conselhos e incentivos.

Posso dizer que tenho muitos bons amigos, amigas, irmãos e irmãs que a vida me presenteou. Agradeço aos maravilhosos amigos e amigas que vieram junto com a física: André, Francisco, Gabriel, Henrique, Hugo, Camila Laura, Maria Clara, Nathan, Pedro, Raphaela e tantos outros. Agradeço aos irmãos e irmãs que acompanham minha caminhada há tempos, alguns de longe e alguns de perto: Dorothy, Gabriel, Gustavo, Jeff, Michelle, Pattie, Paulo e Vasco. Agradeço aos amigos e amigas que fizeram meu ano de 2019 tão maravilhoso: Calango, Gabs, Lina, Isabelle e Marina.

Agradeço ao forró.

Agradeço ao CNPq o apoio financeiro.

Agradeço àqueles não mencionados que, direta ou indiretamente, fizeram parte da minha formação.

Obrigado.

# Resumo

Neste trabalho consideramos a investigação precisa da corrente de energia e seus componentes, calor e trabalho, em alguns sistemas quânticos abertos que são regidos por equações de Lindblad, ou seja, que tem dinâmica markoviana. As expressões para as correntes, bem como a equação principal de Lindblad associada, são obtidas através de um protocolo de interações repetidas. Para a cadeia unidimensional de spins XXZ, apresentamos casos em que diferentes composições de correntes calor e de trabalho, obtidas através do protocolo de interações repetidas, levam à mesma corrente de energia, que pode ser obtida pela equação principal de Lindblad, isto é, para se obter informações sobre o fluxo de calor no sistema e sobre o trabalho realizado sobre o sistema devemos ir além da equação de Lindblad. Ademais, exibimos situações em que a cadeia XXZ apresenta retificação e situações em que pode funcionar em diferentes regimes termodinâmicos: refrigerador, motor e aquecedor. Consideramos também definições alternativas da energia interna de sistemas quânticos abertos que conduzem à diferentes definições de calor e trabalho inseridos no sistema. Mostramos que, para uma certa classe de definições, a informação sobre o fluxo de energia obtido pela equação de Lindblad é a mesma informação obtida pelo protocolo de interações repetidas independente de qual definição de energia interna se usa. Apesar disso, somente através da equação de Lindblad não é possível distinguir calor e trabalho inseridos no sistema. Nossas descobertas deixam claro que, para falar de calor nesses sistemas quânticos de spin impelidos pelas fronteiras, devemos ir além de uma investigação envolvendo apenas a equação principal de Lindblad.

**Palavras-chave:** Sistemas quânticos abertos, Termodinâmica quântica, Equações de Lindblad, Dinâmica markoviana, Cadeia de spins XXZ, Protocolo de interações repetidas

# Abstract

We consider the 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. 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, i.e., to obtain information about the heat flow in the system and about the work done on the system we must go beyond the Lindblad equation. In addition, we exhibit situations in which the XXZ chain presents rectification and situations in which it can operate in different thermodynamic regimes: refrigerator, thermal engine and heater. We also consider alternative definitions of the internal energy of open quantum systems that lead to different definitions of heat and work inserted in the system. We show that, for a certain class of definitions, the information about the energy flow obtained by the Lindblad equation is the same information obtained by the repeated interactions protocol regardless of which definition of internal energy is used. Despite this, only through the Lindblad equation it is not possible to distinguish heat and work inserted in the system. 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.

**Keywords:** Quantum open systems, Quantum thermodynamics, Lindblad equation, Markovian dynamics, XXZ spin chains, Repeated interaction protocol

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>10</b>
<b>2</b>	<b>SISTEMAS QUÂNTICOS ABERTOS</b>	<b>14</b>
2.1	Dinâmica em sistemas fechados	14
2.2	Dinâmica em sistemas abertos	17
<b>3</b>	<b>EQUAÇÃO DE LINDBLAD E PROTOCOLO DE INTERAÇÕES REPETIDAS</b>	<b>21</b>
3.1	Equação de Lindblad	21
3.2	Protocolo de interações repetidas (RIP)	23
<b>4</b>	<b>FLUXOS DE ENERGIA, CALOR E TRABALHO</b>	<b>31</b>
4.1	Definições termodinâmicas	32
4.2	Calor e trabalho no protocolo RI	33
4.3	Definições alternativas da energia interna	35
4.4	Consistência com a equação de Lindblad	37
<b>5</b>	<b>PRODUÇÃO DE ENTROPIA</b>	<b>39</b>
<b>6</b>	<b>APLICAÇÃO NO XXZ</b>	<b>45</b>
<b>6.1</b>	<b>Dinâmica do sistema e expressões para calor e trabalho</b>	<b>45</b>
6.1.1	Dinâmica do sistema	45
6.1.2	Não unicidade da dinâmica de Lindblad	48
6.1.3	Expressões para calor e trabalho	50
<b>6.2</b>	<b>Resultados</b>	<b>52</b>
6.2.1	$N=3$ , $h$ não-graded	52
6.2.2	$N=2$ , $h$ graded	67
<b>7</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>71</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>73</b>

# 1 Introdução

Propriedades e fenômenos de transporte são amplamente estudados em diversas áreas da ciência com o objetivo de entender como se dá o processo de transferência, em geral, espaço-temporal de grandezas físicas tais como: energia, calor, massa, carga, spin, dentre outras, possibilitando assim a manipulação desses em aplicações tecnológicas ou acadêmicas [?, ?]. Para quantidades que obedecem alguma lei de conservação é corriqueiro que exista uma equação de continuidade associada:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{j} \quad (1.1)$$

onde  $\rho$  é uma densidade de uma grandeza conservada globalmente e  $\vec{j}$  a corrente associada à essa grandeza. Essa é uma das equações mais importantes na análise de fenômenos de transporte, uma vez que é habitual nas ciências exatas o estudo de quantidades invariantes. Especificamente na área de transporte de calor, é consideravelmente relevante a lei de Fourier, publicada em 1822. A lei de Fourier é uma relação fenomenológica que relaciona os campos de temperatura  $T(\vec{x}, t)$ , fluxo de calor  $\mathcal{F}(\vec{x}, t)$  e condutividade térmica  $\kappa(\vec{x}, t)$  em um dado ponto do espaço e tempo

$$\mathcal{F} = -\kappa \nabla T \quad (1.2)$$

Apesar dos quase duzentos anos da publicação dessa equação até hoje não se sabe quais as condições necessárias e suficientes que um sistema ou modelo devem obedecer para que a lei de Fourier seja satisfeita. Entretanto vários resultados rigorosos foram demonstrados nessa área, inclusive sobre as hipóteses sob as quais sistemas clássicos podem vir a apresentar retificação térmica, que é basicamente a condução de energia em uma direção preferencial. Se um sistema está em contato com dois reservatórios de temperatura tal que a diferença da temperatura desses é  $\Delta T \neq 0$ , em geral haverá um fluxo de calor  $\mathcal{F}(\Delta T)$  não nulo no sistema que depende da diferença de temperatura. Ao inverter os reservatórios, caso  $\mathcal{F}(-\Delta T) \neq -\mathcal{F}(\Delta T)$ , ou seja, quando não ocorre uma simples inversão do fluxo, diz-se que o sistema apresenta retificação. Um diodo eletrônico é, essencialmente, um retificador, e é inegável o vasto espectro de aplicações possíveis para tal dispositivo. Estudos teóricos sobre diodos e transistores térmicos estão presentes na literatura desde 1936 [1] e ainda hoje constituem uma desafiadora e complexa área de pesquisa [2]. Ademais, já foram e continuam sendo realizados experimentos e simulações computacionais com o objetivo de compreender mais profundamente o processo de retificação térmica.

A busca por dispositivos cada vez menores e mais eficientes do ponto de vista energético nos faz questionar se é possível, no contexto da mecânica quântica, obter dispositivos que apresentem retificação e se esses dispositivos podem apresentar características diferentes dos clássicos. É recorrente, por exemplo, o estudo de cadeias de spin

quânticas, com interesse acadêmica realçado por vários problemas e motivações diferentes: o campo emergente da termodinâmica quântica, o avanço da litografia e a possibilidade de manipular pequenos sistemas quânticos, as propriedades dos átomos frios e fenômenos relacionados, a possibilidade de diferentes regimes de transporte em matéria condensada, a possibilidade de retificadores, etc. Cadeias de spin quânticas, como os sistemas XXZ unidimensionais, são os modelos arquetípicos de sistemas quânticos abertos [?, ?, ?]. Associados a diferentes problemas em mecânica estatística fora de equilíbrio, ótica, informação quântica, etc., eles são exaustivamente investigados. Um sistema amplamente estudado, tanto por sua simplicidade teórica – em alguns casos – quanto pela possibilidade de aplicação em computação quântica, é o modelo de Heisenberg XXZ acoplado fracamente à um reservatório externo (*weak coupling limit*) ou acoplado pela fronteira (*boundary-driven*) à spins com magnetização média e temperatura bem definidas, tipicamente spins em um estado de Gibbs. O modelo consiste em uma cadeia unidimensional de spins 1/2 com interações de primeiros vizinhos e com uma direção preferencial. Nesses dois casos citados, o estado quântico do sistema segue uma dinâmica não-unitária regida por uma equação de Lindblad [3, 4]:

$$\dot{\rho}_S = -i[H_S, \rho_S] + \mathcal{D}(\rho) \quad (1.3)$$

em que  $[\cdot, \cdot]$  é o comutador e  $\mathcal{D}(\rho)$  é o dissipador do sistema, cuja forma é a seguinte

$$\mathcal{D}(\rho) = \sum_k \gamma_k \left[ V_k \rho V_k^\dagger - \frac{1}{2} \{V_k^\dagger V_k, \rho\} \right], \quad (1.4)$$

onde os  $V_k$  são os operadores de Lindblad, e  $\{\cdot, \cdot\}$  o anti-comutador.

Uma dinâmica regida pela equação de Lindblad para o modelo XXZ pode ser obtida através do chamado protocolo de interações repetidas (RIP), que atraiu interesse da comunidade acadêmica devido à simplicidade matemática e vem sendo bastante estudado nos últimos anos [3, 5, 6]. O RIP consiste em seguir os seguintes passos: o estado inicial do sistema composto é um estado produto do estado do sistema com o estado do ambiente, ou seja,  $\rho_T(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_E$ . No nosso caso o ambiente é formado por dois banhos com hamiltonianos independentes do tempo, inicialmente em estados de Gibbs com temperaturas diferentes, acoplados nas fronteiras:  $H_R$  pela direita e  $H_L$  pela esquerda. Deixamos o sistema evoluir devido à unitária  $U = e^{-iH_T\tau/\hbar}$  por um tempo  $\tau$ , onde  $H_T(t) = H_S(t) + H_R + H_L + V(t)$ ,  $V(t)$  é o hamiltoniano da interação sistema-banhos. Após esse tempo  $\tau$  toma-se o traço parcial sobre os banhos e acopla-se dois novos banhos ao sistema reduzido de tal forma a termos novamente um estado produto. Deixamos novamente o sistema composto evoluir por um tempo  $\tau$  e repete-se o procedimento indefinidamente. Sob algumas condições sobre  $H_T$  é possível mostrar que no limite em que  $\tau \rightarrow 0$  a matriz densidade do sistema obedece uma equação de Lindblad [3, 5, 7]. O protocolo RI nos permite fundamentar a análise das trocas energéticas e informacionais entre o sistema e o banho, possibilita distinguir calor e trabalho nas trocas energéticas dos componentes [5, 8]

e por conseguinte estudar a termodinâmica do modelo do ponto de vista de produção de entropia, irreversibilidade, rendimento, etc. Não considerar o processo pelo qual o sistema passou pode levar à interpretações em que a segunda lei da termodinâmica é violada, pois alguns trabalhos já mostraram que é possível que o fluxo de energia, nessa configuração citada acima, seja do banho de menor para o de maior temperatura e que, sob algumas condições, a cadeia unidimensional XXZ sem campo magnético é um genuíno retificador térmico: o fluxo de energia não se modifica ao inverter-se os banhos [9]. Este fato citado é a principal motivação do presente trabalho. A solução desse imbróglio, no protocolo RI, está na identificação do trabalho que é feito sobre o sistema ao se retirar e colocar novos banhos para interagir com o sistema [8]. Mesmo que o hamiltoniano do sistema seja independente do tempo essa operação traz trabalho para o sistema.

Para que seja feito o estudo das propriedades termodinâmicas de sistemas quânticos, primeiramente é necessário definir quais são as grandezas de interesse, como: calor, trabalho, energia interna, entropia, etc. Apesar de que algumas premissas, tal como a primeira lei da termodinâmica, se manterem intactas nas definições, as motivações para uma definição ou outra muitas vezes não é muito clara e, em vista disso, existe mais de uma definição para cada uma dessas essas grandezas. Mostramos neste trabalho que, para uma certa classe de definições da energia interna, há uma consistência da informação sobre a energia do sistema obtida pelo RIP com a informação obtida pela equação de Lindblad. Além disso, mostramos que dentro dessa classe existe uma definição específica que conduz à resultados consistentes com a segunda lei da termodinâmica enquanto que outras definições podem apresentar violações. Fazendo uso dessa definição, a energia interna de um sistema em contato com um ambiente pode é dada por [5]

$$E(t) = \text{Tr}\{\rho_T(t)[H_S(t) + V(t)]\}, \quad (1.5)$$

e da primeira lei da termodinâmica a variação da energia interna de um sistema é soma do trabalho feito sobre o sistema com o calor que flui para o sistema

$$\Delta E(t) = W(t) + Q(t) \quad (1.6)$$

Sendo o hamiltoniano dos banhos constante e usando a definição 1.5, em que a energia de interação está por completo contabilizada na energia do sistema, toda a variação de energia dos banhos só pode ser em forma de calor. Em vista disso, o calor que flui para o sistema é dado por  $Q(t) = \sum_r Q_r(t)$ , onde

$$Q_r(t) = \text{Tr}[H_r \rho_T(0) - H_r \rho_T(t)], \quad r = L, R. \quad (1.7)$$

Juntas, as equações 1.7 e 1.6 implicam que

$$W(t) = \text{Tr}[\rho_T(t)H_T(t) - \rho_t(0)H_T(0)] \quad (1.8)$$

Podemos também definir primeiramente a equação 1.8 com o argumento de que toda variação de energia do sistema composto é em forma de trabalho e que esse trabalho é feito sobre o sistema de interesse já que os reservatórios só trocam energia em forma de calor. Isso em conjunto com a primeira lei da termodinâmica leva à equação 1.7.

A partir dessas definições é possível calcular o fluxo de calor e o trabalho por unidade de tempo realizado sobre o sistema no modelo XXZ durante o protocolo RI e comparar com as expressões obtidas do estado estacionário da equação de Lindblad. Os cálculos mostram que ambas abordagens estão em concordância mas, até o presente momento, somente através do RI é possível discriminar entre fluxo de calor e potência na expressão para a variação da energia interna [8].

## 2 Sistemas quânticos abertos

No presente capítulo, nos dedicaremos ao estudo da dinâmica de sistemas quânticos, com enfoque em sistemas abertos, e dos mapas – operadores que atuam em um espaço vetorial de matrizes – que resultam em evoluções temporais fisicamente aceitáveis de estados quânticos, num sentido que explicitaremos mais adiante.

### 2.1 Dinâmica em sistemas fechados

Quando não há nenhuma ignorância clássica a respeito de um sistema quântico, o sistema pode ser descrito por um vetor de estado (ou ket)  $|\Psi\rangle$  pertencente à um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}_S$  que pode ter dimensão, à princípio, arbitrária.<sup>1</sup> Por ignorância clássica nos referimos, por exemplo, ao desconhecimento de qual o lado de uma moeda está virado para cima quando alguém esconde essa informação após jogá-la para o alto. Sabemos que, no caso ideal, a probabilidade de que o lado da moeda virado para cima seja cara é de cinquenta por cento, isso independente da medição. Mesmo antes de olharmos o resultado podemos assumir que a moeda está em algum dos "estados": cara ou coroa. Na mecânica quântica há uma fundamental diferença da visão clássica com a qual estamos acostumados no dia a dia devido às superposições quânticas. Superposições quânticas parecem completamente impensáveis e estranhas ao senso comum. Senso comum este, que é resultante de eventos cognoscíveis através das nossas sensações cuja sensibilidade parece não ser muito aguçada quando fenômenos quânticos estão em pauta. Para exemplificar, consideremos um ket  $|\Psi\rangle = (|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$  pertencente à um espaço de Hilbert de dimensão dois – kets desse tipo são conhecidos como “qubits” – onde  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$  são autoestados da matriz de Pauli  $\sigma_z$  com autovalores  $+1$  e  $-1$ , respectivamente. O ket  $|\Psi\rangle$  é um estado de superposição dos kets  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , cada um com amplitude de probabilidade  $1/\sqrt{2}$ , isto é, em uma medida de  $\sigma_z$  nesse estado tem-se probabilidade  $1/2$  de medir  $+1$  e probabilidade  $1/2$  de se medir  $-1$ . Embora isso nos faça lembrar da moeda, que metade das vezes dá o resultado cara e metade das vezes coroa, é incorreto afirmar que antes de medir  $\sigma_z$  o sistema se encontrava no ket  $|+\rangle$  ou  $|-\rangle$ . Podemos verificar isso avaliando o valor médio de  $\sigma_x$  nesse estado. O valor médio de  $\sigma_x$  nos estados  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$  é nulo, ou seja,  $\langle +|\sigma_x|+\rangle = \langle -|\sigma_x|-\rangle = 0$ . Desta forma, caso o sistema, antes da medida, estivesse ou no estado  $|+\rangle$  ou no estado  $|-\rangle$ , deveríamos ter que  $\langle \Psi|\sigma_x|\Psi\rangle = 0$ . Entretanto, é simples mostrar que  $\langle \Psi|\sigma_x|\Psi\rangle = 1/2$ . Não podemos, portanto, assumir que o sistema estava em algum dos autoestados de  $\sigma_z$  antes da medição. Esse é um dos simples exemplos que mostra o quão exótico é o universo

<sup>1</sup> Neste trabalho discutiremos somente situações onde os kets pertencem a espaços de Hilbert de dimensão finita, em geral  $\mathbb{C}^n$ , onde  $n$  é um número natural.

quântico.

No estado  $|\Psi\rangle$  considerado acima, embora não possamos saber de antemão qual será o resultado de uma medida, por exemplo, de  $\sigma_z$ , não há nenhuma ignorância clássica sobre o sistema. Sabemos que o sistema se encontra no estado  $|\Psi\rangle$  com cem por cento de certeza. Em cenários desse tipo, onde não há nenhuma ignorância clássica, dizemos que o sistema é puro. Proposta em 1926, a famosa equação de Schrodinger – em uma de suas versões – trata da evolução temporal de vetores de estado:

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

onde  $H$  é o Hamiltoniano do sistema e  $\hbar$  a constante de Planck. A partir desse momento, trabalharemos em unidades tais que  $\hbar = 1$ .

Para obtermos a equação de Schrodinger basta postularmos duas coisas:

- O operador de evolução temporal deve ser linear, ou seja,  $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$ , onde  $U(t, t_0)$  é um operador linear;
- os vetores de estados que representam estados físicos devem permanecer normalizados em cada instante de tempo, ou seja,  $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1$ .

Para os físicos parece perfeitamente natural assumir que a evolução temporal de kets se dá através de um operador linear, pois, supor que o princípio de superposição, com a devida normalização, vale para estados quânticos e que a evolução temporal de um estado superposto é a soma, com mesmos coeficientes anteriores, dos estados constituintes deste, evoluídos no tempo, implica que o operador de evolução é linear. Todavia, a razão para assumir essa premissa é, no fim das contas, devido às observações experimentais. A naturalidade com que aceitamos esse postulado é por conta das observações. Não há razão *a priori* para assumir essa premissa. O segundo postulado é mais simples de justificar desde que aceitemos a interpretação probabilística dos kets, isto é, ao escrever um ket como combinação linear de autovetores de um observável  $A$ , o módulo quadrado do coeficiente de um dado autovetor representa a probabilidade de uma medida do observável  $A$  resultar no autovalor correspondente àquele autovetor. Desta forma, a soma dos módulos quadrados dos coeficientes deve ser igual à unidade para essa interpretação fazer sentido. Dado que este raciocínio se aplica em todos instantes de tempo, segue que os kets devem permanecer normalizados em toda a dinâmica e, não obstante, o operador  $U(t, t_0)$  tem de ser um operador unitário, ou seja,  $UU^\dagger = U^\dagger U = I$ .

Alguns autores preferem postular a equação de Schrodinger e posteriormente deduzir as propriedades acima, que tomamos como postulados. Mais adiante, quando falarmos sobre operações quânticas, que são formas mais gerais de evolução de estados quânticos, assumiremos algumas novas premissas para estabelecermos o tipo de evolução

temporal fisicamente aceitável. Por este motivo, preferimos desde já estabelecer alguns axiomas ou postulados para deduzir a forma como sistemas quânticos evoluem no tempo.

Consideremos agora um sistema quântico que não sabemos dizer se está em um estado  $|\Psi_1\rangle$  ou  $|\Psi_2\rangle$ , diferente do primeiro. Como descrever tal sistema? Seja  $p$  a probabilidade que o sistema esteja no estado  $|\Psi_1\rangle$  e  $1 - p$  a probabilidade de que o sistema esteja no estado  $|\Psi_2\rangle$ . De acordo com as regras básicas de probabilidade, nesse sistema considerado, o valor médio de um dado observável  $A$  é dado por

$$\langle A \rangle = p \langle A \rangle_1 + (1 - p) \langle A \rangle_2 = p \langle \Psi_1 | A | \Psi_1 \rangle + (1 - p) \langle \Psi_2 | A | \Psi_2 \rangle \quad (2.2)$$

Seja  $\{|k\rangle\}$  uma base ortonormal. Utilizando a relação de completeza e a definição do traço de uma matriz, temos que

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_k p \langle \Psi_1 | k \rangle \langle k | A | \Psi_1 \rangle + \sum_k (1 - p) \langle \Psi_2 | k \rangle \langle k | A | \Psi_2 \rangle \\ &= \sum_k p \langle k | A | \Psi_1 \rangle \langle \Psi_1 | k \rangle + \sum_k (1 - p) \langle k | A | \Psi_2 \rangle \langle \Psi_2 | k \rangle \\ &= \sum_k \langle k | \left[ A \left( p |\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + (1 - p) |\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| \right) \right] | k \rangle \\ &= \text{Tr} \left\{ A \left( p |\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + (1 - p) |\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| \right) \right\} \\ &= \text{Tr} \{ A \rho \}, \quad \rho \equiv p |\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + (1 - p) |\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde definimos a matriz  $\rho$ , que nos permite caracterizar o sistema, já que podemos calcular valores médios de acordo com a expressão acima. O operador  $\rho$  é o estado quântico do sistema ou matriz densidade, que nesse caso é um estado misto, no sentido de que não pode ser caracterizado por um único vetor de estado e tem uma ignorância clássica associada. Para definir um estado quântico arbitrário seguimos o mesmo raciocínio: seja  $p_i$  a probabilidade de que o sistema esteja no estado  $|\Psi_i\rangle$ . O estado quântico do sistema, que é o operador que dá toda a informação acessível do sistema, é dado por

$$\rho = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i| \quad (2.4)$$

esse operador tem traço unitário e é um operador positivo, isto é,  $\langle \phi | \rho | \phi \rangle \geq 0$  para qualquer vetor  $|\phi\rangle$ . Essa última propriedade é representada por  $\rho \geq 0$ .

A partir da equação de Schrodinger e lembrando que  $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$ , o que implica que  $\rho(t) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0)$ , é simples obter a equação que dá a evolução temporal de uma matriz densidade, que é a equação de Von-Neumann:

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -i [H(t), \rho(t)] \quad (2.5)$$

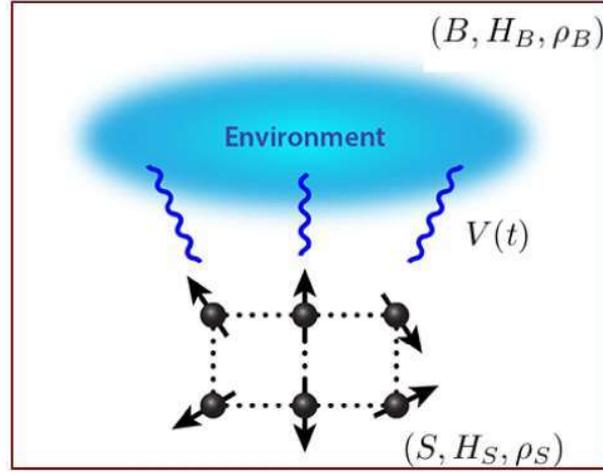


Figura 1 – Representação de um sistema quântico aberto com hamiltoniano  $H_S$  que interage com um ambiente com hamiltoniano  $H_B$  através da interação  $V(t)$

## 2.2 Dinâmica em sistemas abertos

A equação de Von-Neumann 2.5 dá a evolução temporal de um estado quântico fechado, ou seja, que não troca energia, matéria ou informação com nenhum outro sistema ou ambiente. Mesmo que o sistema quântico em questão pertença à um espaço de Hilbert composto  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ , a equação de Von-Neumann continua válida para o estado quântico  $\rho : \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N \rightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ . O que acontece, porém, quando o sistema de interesse troca energia, matéria, informação ou até mesmo os três com um sistema externo? Nesse caso dizemos que o sistema quântico é aberto e necessitamos de uma teoria um pouco mais abrangente do que o que foi tratado até este momento.

Em geral, um sistema quântico aberto é um sistema  $S$  em contato com um sistema  $B$  externo, que tipicamente é chamado de banho. Juntos  $S + B$  constituem o que chamamos de universo.<sup>1</sup> Consideremos um espaço de Hilbert bipartido  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$ . O hamiltoniano que descreve a situação em questão, ou seja, o hamiltoniano do universo é dado por:

$$H(t) = H_S(t) \otimes I_B + I_S \otimes H_B(t) + V(t) \quad (2.6)$$

onde  $H_{S(B)}$  e  $I_{S(B)}$  descrevem, respectivamente, o hamiltoniano e a matriz identidade do sistema (banho) e  $V(t)$  a interação entre  $S$  e  $B$ . A dinâmica do estado quântico  $\rho_T$  do universo  $S + B$  é dada pela equação de Von-Neumann 2.5, conforme anunciado anteriormente.

O estado quântico do sistema  $\rho_S(t)$  é um operador que atua no espaço  $\mathcal{H}_S$  e que pode ser obtido através do estado quântico do universo tomando o traço parcial de  $\rho_T$  em relação ao banho. A operação de traço parcial é uma soma sobre parte dos

<sup>1</sup> Sempre que estivermos nos referindo ao sistema fechado  $S + B$  será utilizado o termo “universo” para que possamos, sem ambiguidade, utilizar o termo “sistema” para falar do sistema de interesse  $S$  que trataremos com mais atenção neste trabalho.

graus de liberdade do universo, muito similar com o procedimento de obter densidades de probabilidades marginais de uma densidade de probabilidade. Seja  $\{|\phi_i\rangle\}$  uma base ortonormal de  $\mathcal{H}_B$ . O estado quântico do sistema  $\rho_S(t)$  é dado por:

$$\rho_S(t) \equiv \text{Tr}_B\{\rho_T(t)\} = \sum_i \langle \phi_i | \rho_T(t) | \phi_i \rangle \quad (2.7)$$

A razão de se tomar esse operador como estado do sistema é simples. Se quisermos fazer a medição de um observável  $O$  que atua no sistema, o observável correspondente que atua no universo é dado por  $O \otimes I_B$ . O valor médio desse observável calculado com o estado do sistema ou com o estado do universo devem ser iguais, ou seja, a seguinte igualdade tem de ser verdadeira:

$$\text{Tr}_S\{O\rho_S\} = \text{Tr}\{(O \otimes I_B)\rho_T\} \quad (2.8)$$

Acontece que se o estado quântico do sistema puder ser obtido do estado quântico do universo através de um mapeamento linear  $\rho_S = f(\rho_T)$ ,  $f : \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B \rightarrow \mathcal{H}_S$ , então o único mapa que satisfaz a equação 2.8 para operadores  $O$  arbitrários é o traço parcial, isto é,  $\rho_S = \text{Tr}_B\{\rho_T\}$  REF[]. Dessa forma, fica justificada a definição 2.7.

Se  $\rho_S(0) \otimes \rho_E$  é o estado inicial do universo, então o estado do sistema pode ser obtido através da chamada operação quântica

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_B\{U(t, t_0)\rho_S(0) \otimes \rho_E U^\dagger(t, t_0)\} \quad (2.9)$$

que pode ser visto como um mapeamento  $\Lambda_{t_0}^t : \mathcal{L}(\mathcal{H}_S) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$  tal que  $\Lambda_{t_0}^t(\rho_S) = \text{Tr}_B\{U(t, t_0)\rho_S \otimes \rho_E U^\dagger(t, t_0)\}$ . Esse mapeamento é chamado de dilatação de Stinespring e é um dos possíveis mapeamentos fisicamente aceitáveis para estados quânticos. Já era de se esperar que este mapeamento fosse fisicamente aceitável pois é resultado de uma evolução unitária seguida da operação de traço parcial, que foi justificada com argumentos físicos relacionados à previsão correta da estatística de observáveis.

Ainda não está claro o que queremos dizer com “fisicamente aceitável” e, portanto, trataremos agora desse tema. Encontraremos com essa nova noção uma classe de mapas mais gerais que mapa responsável pela evolução unitária resultante da equação de Schroedinger. Para obter a equação de Schroedinger postulamos que o operador de evolução temporal tinha de ser linear e que os estados físicos devem permanecer normalizados em cada instante de tempo. Agora, trabalhando com estados possivelmente mistos de sistemas quânticos abertos, consideramos que um mapa linear  $\Lambda : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ,  $\Lambda \in \mathcal{L}(\mathcal{L}(\mathcal{H}))$ , é fisicamente aceitável se:

- $\Lambda$  mapeia estados quânticos em estados quânticos, ou seja, a positividade de um estado quântico e o traço tem de ser preservados. Se  $A > 0$  então  $\Lambda(A) > 0$  e  $\text{Tr}\{A\} = \text{Tr}\{\Lambda(A)\}$ ;

- $\Lambda \otimes I(A \otimes B) > 0$  se  $A \otimes B > 0$ , onde  $B \in \mathcal{H}'$  de dimensão  $M$  arbitrária e  $I$  é a matriz identidade em  $\mathcal{H}'$ .

Se a segunda condição for satisfeita dizemos que o mapa  $\Lambda$  é completamente positivo. Exigir essa condição faz sentido físico pois podemos olhar para o sistema como um ente isolado do universo e que deve preservar a positividade na evolução ou podemos pensar que uma parte remota qualquer do universo está estática – por isso a atuação do operador identidade – enquanto o sistema evolui, e juntos esses formam um sistema composto que deve também ter a positividade preservada. Se ambas as condições são satisfeitas, dizemos que  $\Lambda$  é um mapa completamente positivo que preserva traço (CPTP).

Um resultado muito importante e também muito conhecido é a respeito da forma dos mapas CPTP. Estes podem sempre ser escritos na representação de Kraus[REFS]

$$\Lambda(\rho) = \sum_m K_m \rho K_m^\dagger \quad (2.10)$$

onde  $\{K_m\}$  é um conjunto de operadores, chamados de operadores de Kraus, que satisfazem

$$\sum_m K_m^\dagger K_m = I \quad (2.11)$$

Repare que quando o sistema segue uma evolução unitária então só há um termo na soma em 2.10 que é  $U\rho U^\dagger$ . Por conseguinte, esse tipo de operação quântica generaliza a evolução unitária de sistemas fechados.

Outro resultado interessante é que dado um conjunto de operadores de Kraus sempre é possível obter o mesmo mapeamento através de uma dinâmica unitária em um sistema estendido seguido da operação de traço parcial e, reciprocamente, um mapeamento tal como da equação 2.9 sempre pode ser escrito na forma de um mapa de Kraus. Portanto, são equivalentes as seguintes afirmações:

- O mapa  $\Lambda : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$  é CPTP;
- $\exists \{K_m\}$ ,  $K_m \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ , tal que  $\Lambda(A) = \sum_m K_m A K_m^\dagger$  e  $\sum_m K_m^\dagger K_m = I$ ;  
(Mapa de Kraus)
- $\exists \mathcal{H}'$ ,  $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}')$  e  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}'$  tal que  $\Lambda(A) = \text{Tr}_E\{U A \otimes |\Psi\rangle\langle\Psi| U^\dagger\}$ .  
(Dilatação de Stinespring)

À luz dessas informações, segue que sempre que um sistema interage com um ambiente tal que a evolução do universo é unitária então o estado do sistema segue uma dinâmica descrita por operações quânticas. Além disso, tomamos como fisicamente aceitáveis mapas lineares que fossem CPTP e que preservam traço. Essas condições não muito restritivas e com motivações físicas nos conduzem à uma classe de mapas que

generaliza a ideia de evolução unitária de sistemas fechados e, basicamente, mapeiam estados físicos em estados físicos.

## 3 Equação de Lindblad e protocolo de interações repetidas

No capítulo anterior estudamos as operações quânticas que dão origem à evoluções fisicamente aceitáveis de sistemas quânticos. Essas operações fornecem uma descrição atemporal do sistema quântico que não faz referência à estados temporalmente intermediários da evolução. Para ter acesso ao estado quântico do sistema em um instante qualquer estudaremos as equações mestras que governam sistemas quânticos abertos, em particular, sistemas com dinâmica markoviana. Tais sistemas são regidos pelas conhecidas equações de Lindblad. Na literatura encontram-se com mais frequência dois procedimentos que, a partir de dinâmicas microscópicas específicas, levam o sistema a obedecer uma equação de Lindblad: *weak-coupling limit* e protocolo de interações repetidas. Na segunda seção deste capítulo estudaremos o segundo desses procedimentos, que será de fundamental importância para o restante do trabalho.

### 3.1 Equação de Lindblad

Em muitos casos, obter o estado quântico de um sistema em um instante de tempo arbitrário não é uma tarefa simples se utilizarmos as técnicas expostas no capítulo anterior. Dado um intervalo de tempo e o estado inicial do sistema, os mapas estudados fornecem o estado quântico após passado esse tempo e não dá nenhuma informação sobre estados pelos quais o sistema passa durante a evolução. Para se analisar estados intermediários da evolução é corriqueiro estudar-se as equações que regem a dinâmica do estado quântico de sistemas quânticos abertos, as ditas equações mestras.

Vimos que sistemas quânticos submetidos à uma evolução unitária seguem a equação de Von-Neumann 2.5. Em geral, sistemas quânticos abertos serão regidos por uma equação do tipo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i[H, \rho] + \mathcal{D}(\rho) \quad (3.1)$$

onde  $\mathcal{D}(\rho)$  é o dissipador da equação, responsável pela possível não-unitariedade da equação.

Dado que a evolução do sistema em questão é obtida por um mapa de Kraus  $\Lambda_{t_0}^t$ , ou seja, é fisicamente aceitável nos termos que estabelecemos, existe uma classe de equações mestras específica que rege esse tipo de sistema? Quando a evolução é markoviana, ou seja, (i)  $\Lambda_t^t = I$  e (ii)  $\Lambda_r^t \Lambda_{t_0}^r = \Lambda_{t_0}^t \forall r, t$  e  $t_0$  então a resposta é positiva. Sistemas markovianos são caracterizados pela ausência de memória, isto é, a evolução a partir de

um certo instante de tempo independe dos acontecimentos anteriores. Essa característica é explicitada através da propriedade de divisibilidade dos mapas  $\Lambda_r^t \Lambda_{t_0}^r = \Lambda_{t_0}^t \forall r, t$  e  $t_0$ . Portanto, se o mapa é CPTP e a evolução é markoviana então a equação mestra que rege o sistema terá a forma uma equação de Lindblad [REFS], dada por

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -i[H(t), \rho(t)] + \sum_k \gamma_k(t) \left[ L_k(t) \rho(t) L_k^\dagger(t) - \frac{1}{2} \{ L_k^\dagger(t) L_k(t), \rho(t) \} \right] \quad (3.2)$$

onde  $H(t)$  e  $L_k(t)$  podem ser dependentes do tempo, com  $H(t)$  hermitiano e  $\gamma_k(t) \geq 0 \forall k$  e tempo  $t$ . Reciprocamente, se um sistema quântico obedece à equação 3.2 então a dinâmica é markoviana e os mapas responsáveis pela evolução do sistema são CPTP e preservam traço. Os operadores  $L_k$  são chamados operadores de Lindblad ou operadores de transição, pois são representam os tipos de transições abruptas que podem ocorrer no sistema tais como os resultados de medições descritas por operações quânticas que não preservar traço.

Diversos sistemas que obedecem equações de Lindblad já foram amplamente estudados, tais como cadeias de osciladores e cadeias spins em contato com reservatórios diversos, decaimento em sistemas de dois níveis, interação matéria-radiação, diversos modelos que são descritos pelas operações de *amplitude damping channel* e *phase damping*, etc. Não obstante, a equação de Von-Neumann é um caso particular da equação de Lindblad quando o dissipador é nulo.

Como dito no parágrafo inicial do capítulo, dois procedimentos são mais comuns na literatura para a obtenção de equações de Lindblad: *weak-coupling limit* e protocolo de interações repetidas. Os operadores de Lindblad das equações obtidas pelo *weak-coupling limit* geralmente atuam não-trivialmente em todo o espaço de Hilbert do sistema, causando transições entre autoestados do hamiltoniano deste. Nesse caso, as equações mestras são chamadas de *global Lindblad master equations*. Já quando é utilizado o protocolo de interações repetidas, os operadores de Lindblad geralmente atuam não-trivialmente somente em algum subespaço estrito do espaço de Hilbert do sistema. Nesse caso, as equações mestras são chamadas de *local Lindblad master equations*. Quando operadores locais atuam na fronteira dos sistemas, por exemplo, no último e no primeiro spin de uma cadeia unidimensional de spins, a equação mestra é chamada de *boundary-driven Lindblad master equation*.

Nos próximos capítulos será exibido um resultado a respeito da não-unicidade de equações de Lindblad locais. Mostramos que uma mesma equação de Lindblad pode descrever diferentes configurações do universo e esses distintos universos podem ser distinguidos através da divisão do fluxo de energia para o sistema em trabalho e calor por unidade de tempo. Somente através da equação de Lindblad não é possível, em alguns casos, obter a informação sobre o fluxo de calor para o sistema e a quantidade de trabalho realizada sobre o sistema. Para se ter acesso à essas informações é necessário analisar a dinâmica do universo. Esse é um dos pontos mais importantes deste trabalho.

## 3.2 Protocolo de interações repetidas (RIP)

Uma das possíveis maneiras de fazer com que o estado quântico de um sistema seja regido por uma equação de Lindblad é submetê-lo à um processo de repetidas interações com diferentes unidades externas ao sistema. As unidades devem ser preparadas separadamente tal que haja independência estatística entre essas e a duração da interação de cada unidade com o sistema é de  $\tau \rightarrow 0$ . Esse tipo de protocolo tem sido estudado pelo menos desde 2002 em artigos de Ziman, Scarani et al. que tratam da transferência de informação entre um sistema de interesse e as unidades que repetidamente entram em contato com tal sistema. Recentemente, com o crescente interesse da comunidade acadêmica na construção de uma teoria que trate da termodinâmica de sistemas quânticos abertos, considerar dinâmicas sujeitas ao RIP passou a ser um dos procedimentos paradigmáticos na pesquisa envolvendo sistemas quânticos abertos. Isso resulta principalmente da simplicidade matemática que alguns casos podem apresentar, como por exemplo submeter ao RIP os modelos de Ising quântico unidimensional com  $N = 2$  em contato com dois ambientes (unidades) ou ainda o sistema de dois osciladores harmônicos acoplados também em contato com dois reservatórios. Esses modelos, dependendo dos tipos de ambiente e das interações sistema-ambiente tem solução analítica e servem de *toy model* na investigação da termodinâmica quântica.

Diferentemente dos sistemas quânticos acoplados à reservatórios markovianos no *weak-coupling limit*, os operadores de Lindblad que aparecem nos dissipadores das equações que regem as dinâmicas dos sistemas sujeitos ao RIP que estudaremos, atuam não trivialmente somente em um subespaço do espaço de Hilbert do sistema de interesse, e por isso as equações de Lindblad geradas por operadores com essa característica são denominadas *boundary-driven Lindblad master equation*. O estado do sistema, quando esse é acoplado à reservatórios markovianos no *weak-coupling limit*, obedece à equação de Lindblad onde os operadores de Lindblad atuam, em geral, não trivialmente em todo o espaço de Hilbert do sistema, causando transições entre os autoestados do hamiltoniano do sistema. Nesse caso as equações são denominadas *global Lindblad master equation*.

O RIP consiste em seguir os seguintes passos: tomamos o estado inicial do universo (sistema+ambiente) como um estado produto do estado do sistema com o estado do ambiente, ou seja,  $\rho_T(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_E$ . O hamiltoniano do universo é dado pela soma dos hamiltonianos do sistema com o hamiltoniano do ambiente e a interação sistema-ambiente:  $H_T = H_S + H_E + V$ . Deixamos o universo evoluir unitariamente por um tempo  $\tau$  de modo que  $\rho_T(\tau) = e^{-iH_T\tau} \rho_T(0) e^{iH_T\tau}$ . Tomamos o traço parcial em relação ao ambiente de forma a obter o estado do sistema no tempo  $\tau$ :  $\rho_S(\tau) = \text{Tr}_E\{\rho_T(\tau)\}$ . Acopla-se ao sistema um novo ambiente com o mesmo estado  $\rho_E$  e repete-se indefinidamente o procedimento.

O processo descrito acima é um RIP extremamente geral e não restritivo. O protocolo com que trabalharemos ao longo da dissertação será acrescido de algumas

hipóteses: consideremos um sistema quântico  $S$  composto por  $N$  subsistemas tal que o hamiltoniano de  $S$  é dado por  $H_S = \sum_{i=1}^N H_{S_i} + H_I$ , onde  $H_I$  contém todas as interações entre os subsistemas. No intervalo temporal  $[n\tau, (n+1)\tau)$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , associado ao  $i$ -ésimo subsistema, seja  $H_i^n$  o hamiltoniano do ambiente  $E_i$  e  $V_i^n$  a interação entre  $S_i$  e  $E_i$ . A interação será da forma  $V_i^n(t) = \Theta(t - n\tau)\Theta(n\tau + \tau - t)v_i/\sqrt{\tau}$ , onde  $\Theta(t)$  é a função degrau de Heaviside:

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1, & \text{se } t \geq 0 \\ 0, & \text{se } t < 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

ou seja, a interação do sistema com o conjunto das  $n$ -ésimas unidades é ligada no instante  $t = n\tau$  e desligada no instante  $t = (n+1)\tau$ . Consideraremos que o estado inicial do ambiente em cada etapa do RIP é um produto estados de Gibbs, ou seja, cada unidade é preparada separadamente em um estado de Gibbs:

$$\rho_E^n = \omega_{\beta_1}(H_1^n) \otimes \dots \otimes \omega_{\beta_N}(H_N^n) \quad (3.4)$$

$$\omega_{\beta_i}(H_i^n) = \frac{e^{-\beta_i H_i^n}}{Z_i} \quad (3.5)$$

onde  $Z_i = \text{Tr}\{e^{-\beta_i H_i^n}\}$ . Como veremos adiante, existe um trabalho associado com a variação da interação do sistema com o ambiente, independente de o hamiltoniano do sistema ser constante no tempo ou não. Essa é portanto uma diferença fundamental de sistemas quânticos acoplados a um ou mais reservatórios markovianos e de sistemas sujeitos ao RIP. No primeiro caso o ambiente é estático e troca energia com o sistema somente em forma de calor. Mostraremos nos capítulos posteriores que no modelo XXZ unidimensional de spins sujeito ao RIP é possível, em processos cíclicos, transferir calor de uma fonte fria para uma fonte quente, e isso só acontece quando o agente externo realiza trabalho para que a dinâmica ocorra, configurando assim um regime em que o XXZ funciona como um refrigerador.

O hamiltoniano do universo (sistema + banho) no intervalo  $[n\tau, (n+1)\tau)$  é dado por  $H_T = H_I + \sum_{i=1}^N H_{S_i} + H_i^n + V_i^n \equiv H_S + H_E + v/\sqrt{\tau}$ , de modo que:

$$\rho_S[(n+1)\tau] = \text{Tr}_E\{e^{-iH_T\tau} \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n e^{iH_T\tau}\} \quad (3.6)$$

que, não coincidentemente, é exatamente da forma dos mapas de Stinespring, resultando portanto em uma dinâmica fisicamente aceitável no sentido já discutido na seção 2.

Para se obter uma dinâmica markoviana para o sistema toma-se o limite  $\tau \rightarrow 0$  e é feita a restrição usual de que  $\text{Tr}_{E_i}\{\omega_{\beta_i}(H_i^n)V_i^n\} = 0$ .

Utilizando a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (3.7)$$

segue que:

$$\begin{aligned}
 \rho_S[(n+1)\tau] &= \text{Tr}_E \left\{ \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n - i\tau [H_T, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n] - \frac{\tau^2}{2} [H_T, [H_T, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n]] + \dots \right\} \\
 &= \text{Tr}_E \left\{ \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n - i\tau^{1/2} [v, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n] \right. \\
 &\quad \left. - \tau \left( i \left[ H_I + \sum_k H_{S_k} + H_k, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n \right] + \frac{1}{2} [v, [v, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n]] \right) \right. \\
 &\quad \left. + 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^n]] \} + O(\tau^{3/2}) \\
 &= \rho_S(n\tau) - i\tau [H_S, \rho_S(n\tau)] - \frac{\tau}{2} \sum_{i,k} \text{Tr}_E \{ [v_i, [v_k, \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n]] \} + O(\tau^{3/2}) \\
 &= \rho_S(n\tau) - i\tau [H_S, \rho_S(n\tau)] - \frac{\tau}{2} \sum_{i,k} \text{Tr}_E \{ v_i v_k \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n - v_i \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n v_k \\
 &\quad - v_k \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n v_i + \rho_S(n\tau) \otimes \rho_E^n v_k v_i \} + O(\tau^{3/2}) \\
 &= \rho_S(n\tau) - i\tau [H_S, \rho_S(n\tau)] - \frac{\tau}{2} \left\{ \sum_{i \neq k} \left[ \text{Tr}_{E_i} \{ v_i \omega_{\beta_i} \} \text{Tr}_{E_k} \{ v_k \omega_{\beta_k} \} \rho_S(n\tau) \right. \right. \\
 &\quad \left. - \text{Tr}_{E_i} \{ v_i \rho_S(n\tau) \omega_{\beta_i} \} \text{Tr}_{E_k} \{ \omega_{\beta_k} v_k \} \right] - \text{Tr}_{E_k} \{ v_k \rho_S(n\tau) \omega_{\beta_k} \} \text{Tr}_{E_i} \{ \omega_{\beta_i} v_i \} \} \\
 &\quad \left. + \rho_S(n\tau) \text{Tr}_{E_i, E_k} \{ \omega_{\beta_i} \omega_{\beta_k} v_k v_i \} \right] + \sum_k \left[ \text{Tr}_{E_k} \{ v_k^2 \omega_{\beta_k} \} \rho_S(n\tau) \right. \\
 &\quad \left. - 2 \text{Tr}_{E_k} \{ v_k \rho_S(n\tau) \omega_{\beta_k} v_k \} + \rho_S(n\tau) \text{Tr}_{E_k} \omega_{\beta_k} v_k^2 \right] \Big\} + O(\tau^{3/2}) \\
 &= \rho_S(n\tau) - i\tau [H_S, \rho_S(n\tau)] - \frac{\tau}{2} \sum_k \left[ \text{Tr}_{E_k} \{ v_k^2 \omega_{\beta_k} \} \rho_S(n\tau) \right. \\
 &\quad \left. - 2 \text{Tr}_{E_k} \{ v_k \rho_S(n\tau) \omega_{\beta_k} v_k \} + \rho_S(n\tau) \text{Tr}_{E_k} \omega_{\beta_k} v_k^2 \right] + O(\tau^{3/2}) \tag{3.8}
 \end{aligned}$$

onde foi usado que  $\text{Tr}_{E_i}\{\omega_{\beta_i}(H_i^n)V_i^n\} = \text{Tr}_{E_i}\{[H_i, \omega_{\beta_i}]\} = 0$ . Tomando o limite em que  $\tau$  vai à zero, temos que:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S}{dt} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\rho_S[(n+1)\tau] - \rho_S(n\tau)}{\tau} = -i[H_S, \rho_S] - \frac{1}{2} \sum_k \left[ \text{Tr}_{E_k}\{v_k^2 \omega_{\beta_k}\} \rho_S(n\tau) \right. \\ \left. - 2 \text{Tr}_{E_k}\{v_k \rho_S(n\tau) \omega_{\beta_k} v_k\} + \rho_S(n\tau) \text{Tr}_{E_k} \omega_{\beta_k} v_k^2 \right] \end{aligned} \quad (3.9)$$

Focaremos a partir de agora em um tipo de interação que contempla grande parte dos trabalhos na área de sistemas quânticos abertos. Seja  $v_i = g_i(A_i L_i^\dagger + A_i^\dagger L_i)$ , onde os operadores  $A_i$  e  $A_i^\dagger$  atuam no espaço de Hilbert do  $i$ -ésimo ambiente e causam transições entre os autoestados do hamiltoniano desse:

$$A_i |n\rangle = \alpha_n^i |n-1\rangle \quad (3.10)$$

$$A_i^\dagger |n\rangle = \beta_n^i |n+1\rangle \quad (3.11)$$

onde  $H_i |n\rangle = \omega_n^i |n\rangle$ . Os operadores  $L_i$  à princípio são arbitrários para a presente análise. Em seções posteriores limitaremos a classe desses operadores. Retornando à equação 3.9 segue que:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S = -i[H_S, \rho_S] - \frac{1}{2} \sum_k g_k^2 \left[ \text{Tr}_{E_k}\{A_k^2 \omega_{\beta_k}\} L_k^\dagger \rho_S + \text{Tr}_{E_k}\{A_k A_k^\dagger \omega_{\beta_k}\} L_k^\dagger L_k \rho_S \right. \\ \left. + \text{Tr}_{E_k}\{A_k^\dagger A_k \omega_{\beta_k}\} L_k L_k^\dagger \rho_S + \text{Tr}_{E_k}\{A_k^{\dagger 2} \omega_{\beta_k}\} L_k^2 \rho_S + \text{Tr}_{E_k}\{A_k^2 \omega_{\beta_k}\} \rho_S L_k^\dagger \right. \\ \left. + \text{Tr}_{E_k}\{A_k A_k^\dagger \omega_{\beta_k}\} \rho_S L_k^\dagger L_k + \text{Tr}_{E_k}\{A_k^\dagger A_k \omega_{\beta_k}\} \rho_S L_k L_k^\dagger + \text{Tr}_{E_k}\{A_k^{\dagger 2} \omega_{\beta_k}\} \rho_S L_k^2 \right. \\ \left. - 2 \left[ \text{Tr}_{E_k}\{A_k^2 \omega_{\beta_k}\} L_k^\dagger \rho_S L_k^\dagger + \text{Tr}_{E_k}\{A_k A_k^\dagger \omega_{\beta_k}\} L_k \rho_S L_k^\dagger + \text{Tr}_{E_k}\{A_k^\dagger A_k \omega_{\beta_k}\} L_k^\dagger \rho_S L_k \right. \right. \\ \left. \left. + \text{Tr}_{E_k}\{A_k^{\dagger 2} \omega_{\beta_k}\} L_k \rho_S L_k \right] \right] \end{aligned} \quad (3.12)$$

Como o estado de cada ambiente é um estado de Gibbs, utilizando a equação 3.10 e a ortonormalidade dos autoestados dos respectivos hamiltonianos segue que:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{E_k}\{A_k^2 \omega_{\beta_k}\} &= \frac{1}{Z_k} \text{Tr}_{E_k}\{A_k^2 e^{-\beta_k H_k}\} = \frac{1}{Z_k} \sum_n \langle n | A_k^2 e^{-\beta_k H_k} | n \rangle = \frac{1}{Z_k} \sum_n \langle n | A_k^2 | n \rangle e^{-\beta_k \omega_n^k} \\ &= \frac{1}{Z_k} \sum_n \alpha_n^k \alpha_{n+1}^k \langle n | n+2 \rangle e^{-\beta_k \omega_n^k} = 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

Similarmente, utilizando a equação 3.11, vale também que  $\text{Tr}_{E_k} \{A_k^\dagger \omega_{\beta_k}\} = 0$ . À luz desses resultados a equação 3.12 se torna um pouco mais simples e fica evidente que a equação diferencial para o estado quântico do sistema é uma equação de Lindblad:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S &= -i[H_S, \rho_S] - \frac{1}{2} \sum_k \left[ \gamma_k^- (L_k^\dagger L_k \rho_S + \rho_S L_k^\dagger L_k - 2L_k \rho_S L_k^\dagger) + \gamma_k^+ (L_k L_k^\dagger \rho_S + \rho_S L_k L_k^\dagger - 2L_k^\dagger \rho_S L_k) \right] \\ &= -i[H_S, \rho_S] + \sum_k \left[ \gamma_k^- \left( L_k \rho_S L_k^\dagger - \frac{1}{2} \{L_k^\dagger L_k, \rho_S\} \right) + \gamma_k^+ \left( L_k^\dagger \rho_S L_k - \frac{1}{2} \{L_k L_k^\dagger, \rho_S\} \right) \right] \\ &= -i[H_S, \rho_S] + \sum_k \mathcal{D}_k(\rho_S) \end{aligned} \quad (3.14)$$

onde definimos as taxas  $\gamma_k^+ \equiv \langle A_k^\dagger A_k \rangle g_k^2$ ,  $\gamma_k^- \equiv \langle A_k A_k^\dagger \rangle g_k^2$  e os dissipadores

$$\mathcal{D}_k(\rho) \equiv \gamma_k^- \mathcal{L}[L_k, \rho] + \gamma_k^+ \mathcal{L}[L_k^\dagger, \rho] \quad (3.15)$$

com  $\mathcal{L}[A, \rho] \equiv A\rho A^\dagger - \frac{1}{2} \{A^\dagger A, \rho\}$

Mostramos então que submeter um sistema ao RIP com  $N$  banhos e interação do tipo  $v = g(AL^\dagger + A^\dagger L)$  entre o sistema e cada banho resulta numa dinâmica regida por uma equação de Lindblad. Em seções posteriores mostraremos que, para um dado sistema, uma mesma equação de Lindblad pode ser obtida pela interação com ambientes diferentes através do RIP. Assim sendo, somente através da equação de Lindblad não é possível obter toda a informação sobre o sistema e os fluxos entre o sistema e sua vizinhança. Veremos, por exemplo, que dinâmicas com valores diferentes de fluxos de calor e trabalho para o sistema podem ter uma mesma equação de Lindblad associada. Não levar isso em conta pode levar à interpretações errôneas das grandezas termodinâmicas. Em um artigo (REF) com mais de uma centena de citações de Levy e Kosloff é feita uma crítica sobre as equações de Lindblad locais (*boundary-driven*). Sob algumas hipóteses é possível mostrar que energia pode fluir de um reservatório frio para um quente, aparentemente violando a segunda lei da termodinâmica. Entretanto, Levy e Kosloff e diversos 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. Aí reside o problema, pois a equação de Lindblad não contém toda a informação do sistema/vizinhança. Em trabalhos mais recentes de Barra, Pereira e Landi essa questão é esclarecida, uma vez que através de uma dinâmica microscópica, o RIP, 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.

A seguir faremos algumas restrições nos operadores  $L_k$  para obtermos alguns resultados mais específicos e também esclarecedores sobre a termodinâmica no RIP. Antes porém, estudemos o que De Chiara, et al, chamam de "autooperadores". Seja  $H$

um hamiltoniano arbitrário que atua em um espaço de Hilbert de dimensão finita e  $A$  um operador tal que  $[H, A] = -\omega A$  para algum  $\omega > 0$ . Nesse caso, dizemos que  $A$  é autooperador (*eigenoperator*) de  $H$ . Seja  $\{|n\rangle\}$  a base ortonormal de autovetores de  $H$  tal que  $H|n\rangle = \omega_n|n\rangle$ . Segue que

$$\begin{aligned} \omega A|n\rangle &= -[H, A]|n\rangle = -(HA - AH)|n\rangle = -HA|n\rangle + \omega_n A|n\rangle \\ \implies (\omega - \omega_n)A|n\rangle &= -HA|n\rangle \\ \implies H(A|n\rangle) &= (\omega_n - \omega)(A|n\rangle) \end{aligned} \quad (3.16)$$

ou seja,  $A|n\rangle$  é autovetor de  $H$  com autovalor  $\omega_n - \omega$ . Similarmente, para  $A^\dagger$  temos

$$[H, A] = -\omega A \implies [H, A]^\dagger = -\omega A^\dagger \implies H(A^\dagger|n\rangle) = (\omega_n + \omega)(A^\dagger|n\rangle) \quad (3.17)$$

ou seja,  $A^\dagger|n\rangle$  é autovetor de  $H$  com autovalor  $\omega_n + \omega$ . Conclui-se então que os operadores  $A$  e  $A^\dagger$  funcionam como operadores de abaixamento (destruição) e levantamento (criação), respectivamente, nos autoestados de  $H$ .

Suponhamos agora a seguinte interação entre o  $i$ -ésimo subsistema e o  $i$ -ésimo banho:

$$v_i = \sum_k g_{ik}(L_{ik}^\dagger A_{ik} + A_{ik}^\dagger L_{ik}) \quad (3.18)$$

onde  $[H_{S_i}, L_{ik}] = -\omega_{ik}^S$  e  $[H_i, A_{ik}] = -\omega_{ik}^E$ , ou seja,  $L_{ik}$  e  $A_{ik}$  são autooperadores de  $H_{S_i}$  e  $H_i$  com energias  $\omega_{ik}^S$  e  $\omega_{ik}^E$ , respectivamente.  $\{\omega_{ik}^{S,E}\}$  é o conjunto de possíveis transições energéticas no sistema/ambiente. De Chiara, et al, assumem (REF) a condição de que  $\omega_{ik}^S = \omega_{ik}^E$  e isso implica que quando ocorre uma transição de energia  $+\omega_{ik}$  no sistema, a transição oposta de  $-\omega_{ik}$  ocorre no banho. Embora aparentemente pareça uma consideração muito geral e natural esse não é o caso. Para exemplificar, consideremos um sistema de dois spins com hamiltoniano dado por

$$H = \frac{h_1}{2}\sigma_1^z + \frac{h_2}{2}\sigma_2^z + \gamma(\sigma_1^+\sigma_2^- + \sigma_1^-\sigma_2^+) \quad (3.19)$$

No contexto presente, podemos interpretar o spin do 2 como um ambiente do spin 1 e observar que a interação é da forma 3.18. Em vista da notação feita ao escrevermos a equação 6.6, fazemos as seguintes identificações:  $H_{S_1} = h_1\sigma_1^z/2$ ,  $H_1 = h_2\sigma_2^z/2$  e  $V_1 = \gamma(\sigma_1^+\sigma_2^- + \sigma_1^-\sigma_2^+)$ . Segue que  $[H_{S_1}, \sigma_1^-] = -h_1\sigma_1^-$  e  $[H_1, \sigma_2^-] = -h_2\sigma_2^-$ . Identificamos assim as energias de transição  $h_1$  e  $h_2$  possíveis do sistema e banho, respectivamente. Nesse simples exemplo, vemos que se  $h_1$  e  $h_2$ , que normalmente representam intensidade de campos magnéticos controlados externamente, forem diferentes, as transições nos sistemas individuais são de energias também diferentes. Isso mostra que assumir conjuntos de possíveis transições energéticas iguais no sistema e banho é uma condição pouco geral.

Esses detalhes e observações conduzem também à interessantes resultados. No modelo XXZ boundary-driven, que será detalhado na seção 6, os dissipadores são dados por

$$\mathcal{D}_L(\rho) = \frac{\Gamma}{4} \left\{ (1 + f_L) \left[ 2\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - \{ \sigma_1^- \sigma_1^+, \rho \} \right] + (1 - f_L) \left[ 2\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - \{ \sigma_1^+ \sigma_1^-, \rho \} \right] \right\} \quad (3.20)$$

$$\mathcal{D}_R(\rho) = \frac{\Gamma}{4} \left\{ (1 + f_R) \left[ 2\sigma_N^+ \rho \sigma_N^- - \{ \sigma_N^- \sigma_N^+, \rho \} \right] + (1 - f_R) \left[ 2\sigma_N^- \rho \sigma_N^+ - \{ \sigma_N^+ \sigma_N^-, \rho \} \right] \right\} \quad (3.21)$$

com  $f_i = -\tanh(\beta_i h_i/2)$ . Os operadores  $\sigma_1^\pm$  atuam somente no primeiro spin da cadeia de maneira não trivial e similarmente  $\sigma_N^\pm$  no N-ésimo spin. Se desconectarmos o primeiro spin do resto da cadeia o estado desse spin obedece a seguinte equação de Lindblad:

$$\frac{d\rho_{s_1}}{dt} = -i \frac{h_1}{2} [\sigma_1^z, \rho_{s_1}] + \mathcal{D}_L(\rho_{s_1}) \quad (3.22)$$

O resultado interessante é que o spin termaliza se, somente se,  $h_1 = h_L$  ou  $f_L = 1$ . Por termalizar queremos dizer que o spin vai para o estado estacionário de Gibbs  $e^{-\beta_L H_{s_1}}/Z$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_L(e^{-\frac{\beta_L h_1 \sigma_1^z}{2}}) &= 2\gamma(1 - f_L) e^{-\frac{\beta_L h_1 \sigma_1^z}{2}} \left[ e^{-\beta_L h_1} - e^{-\beta_L h_L} \right. \\ &\quad \left. + \left( e^{-\beta_L (h_L - h_1)} - 1 + e^{-\beta_L h_L} - e^{-\beta_L h_1} \right) \sigma_1^+ \sigma_1^- \right] = 0 \iff h_1 = h_L \text{ ou } f_L = 1 \end{aligned} \quad (3.23)$$

Como veremos adiante, a não termalização do spin quando  $h_1 \neq h_L$  se deve à necessária realização de trabalho sobre o sistema para que esse obedeça à equação 3.22. É comum vários autores utilizarem  $h_1 = h_L$  (REFS) mas desconhecemos uma referência onde é explicada a motivação dessa escolha. Como já dito, a princípio  $h_1$  e  $h_L$  são parâmetros externos controlados de maneira independente, como campos em regiões diferentes dos espaço.

Assumindo então que as interações obedecem a equação 3.18 temos que:

$$\begin{aligned} [H_{S_i} + H_i, V_i] &= \sum_k g_{ik} \left[ H_{S_i} + H_i, L_{ik}^\dagger A_{ik} + L_{ik} A_{ik}^\dagger \right] \\ &= \sum_k g_{ik} \left[ (\omega_{ik}^S - \omega_{ik}^E) L_{ik}^\dagger A_{ik} - (\omega_{ik}^S - \omega_{ik}^E) L_{ik} A_{ik}^\dagger \right] \\ &= \sum_k g_{ik} (\omega_{ik}^S - \omega_{ik}^E) (L_{ik}^\dagger A_{ik} - L_{ik} A_{ik}^\dagger) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Veremos adiante que esse termo esta relacionado com a existência de trabalho no balanço energético do i-ésimo subsistema. Isso pode ser entendido lembrando que se  $[A, B] \neq 0$  então esses operadores não podem ser diagonalizados pela mesma base, ou seja,  $B$  mistura

autoestados de  $A$  e vice-versa. Então se  $[H_{S_i} + H_i, V_i] \neq 0$  é possível que a energia do subsistema composto pelo  $i$ -ésimo ambiente e  $S_i$  varie devido à interação entre esses, independente de haver ou não alguma outra interação com o resto do sistema. Isso indica que para “ligar” a interação entre essas partes é necessária a realização de trabalho. De maneira similar segue que:

$$\begin{aligned} [H_S + H_E, V] &= [H_I, V] + \sum_i [H_{S_i} + H_i, V_i] \\ &= [H_I, V] + \sum_{i,k} g_{ik} (\omega_{ik}^S - \omega_{ik}^E) (L_{ik}^\dagger A_{ik} - L_{ik} A_{ik}^\dagger) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Veremos que a realização de trabalho sobre o sistema como um todo através da interação está vinculada aos termos da equação acima de forma independente.

No contexto do RIP, da equação 3.15, sabemos que os dissipadores nesse cenário considerado são dados por:

$$\mathcal{D}_i(\rho_S) = -\frac{1}{2} \text{Tr}_{E_i} \{ [V_i, [V_i, \rho_S \rho_{E_i}]] \} = \sum_k \gamma_{ik}^- \mathcal{L}[L_{ik}, \rho_S] + \gamma_{ik}^+ \mathcal{L}[L_{ik}^\dagger, \rho_S] \quad (3.26)$$

e portanto

$$\frac{d\rho_S}{dt} = -i[H_S, \rho_S] + \sum_{i,k} \gamma_{ik}^- \mathcal{L}[L_{ik}, \rho_S] + \gamma_{ik}^+ \mathcal{L}[L_{ik}^\dagger, \rho_S] \quad (3.27)$$

## 4 Fluxos de energia, calor e trabalho

O processo de produção de ferramentas cada vez menores, atualmente em escalas nanométricas, suscita a necessidade de se estudar e desenvolver uma teoria que trate da eficiência dessas ferramentas microscópicas. Essa exigência, mais do que devida ao custo financeiro de operação desses dispositivos, é consequência da finitude dos recursos energéticos e insustentabilidade do uso antrópico desregulado de energia. No século XVIII, a descoberta de que é possível usar o calor gerado pela queima de carvão para gerar movimento revolucionou os modos de produção e, por conseguinte, toda a estrutura social. Ademais, motivou e originou o estudo da termodinâmica, teoria que inicialmente visava descrever as relações entre as grandezas macroscópicas como pressão, volume e temperatura de algum sistema, tipicamente um gás, e entender a natureza física do calor.

O estudo da natureza do calor remonta às teorias presentes na Antiguidade, tais como a tese dos quatro elementos de Aristóteles (séc. IV a.C.) que relacionava os fenômenos associados ao calor com o elemento fogo e o atomismo de Leucipo (séc. V a.C.) e Demócrito (séc. V a.C.) que defendia um mundo formado pela combinação de diferentes átomos cujos movimentos ocorrem em um espaço vazio. Mais recentemente, no final da Idade Média e durante a Idade Moderna, houveram também teorias com influências alquimistas para a compreensão da natureza do calor e a teoria do flogisto de Georg Stahl (1669-1734), amplamente defendida por Joseph Priestley (1733-1804) e outros cientistas importantes da época. Uma mudança muito relevante no pensamento dos pesquisadores desse período ocorreu quando Antonie Lavoisier (1743-1794) publicou sua teoria do "calórico", causando um abandono da teoria do flogisto por grande parte dos cientistas e a modificação da concepção de realidade destes, que é um exemplo da ideia de Thomas Kuhn (1962, p. 157) quando diz que "embora o mundo não mude com uma mudança de paradigma, depois dela o cientista trabalha em um mundo diferente". Já na Idade Contemporânea duas correntes de pensamentos principais disputaram espaço no que se refere ao entendimento do que é o calor: a teoria de Lavoisier de que calor é um fluido indestrutível, o "calórico", que se move de um corpo à outro e a teoria influenciada pela mecânica de Newton de que o calor é uma forma de movimento microscópico desordenado.

Atualmente entende-se que a teoria do calórico é falha: não há um fluido indestrutível que sai dos corpos quentes e vai para os frios. Entretanto, a analogia do calor com um fluido persiste até hoje nos livros e artigos acadêmicos quando diz-se, por exemplo, que "o calor flui de um corpo quente para um corpo frio" ou quando é citada a Lei de Fourier que afirma que o fluxo de calor em um dado ponto do espaço é proporcional ao gradiente de temperatura avaliado nesse ponto. Embora saibamos que se trata de uma simples semelhança teórica, ambas as sentenças carregam um pouco da herança da teoria de

Lavoisier do calórico.

Benjamin Thompson (1753-1814) foi um dos cientistas que advogou com veemência a favor da teoria de que o calor é uma forma de energia devido ao movimento desordenado dos constituintes da matéria, tendo realizado diversos experimentos, entre eles vários que envolviam a geração de calor por atrito. Na visão clássica, manteve-se intacta essa teoria e até hoje é ensinado nas universidades e escolas que quando um corpo quente esfria então o nível de agitação randômica de suas moléculas diminui e o contrário acontece quando um corpo se esquentam.

Da primeira lei da termodinâmica sabemos que a variação da energia interna de um sistema é dada pela soma do trabalho realizado sobre o sistema e o calor transferido para o próprio. Para mantermos consistência teórica dos conceitos a nível quântico e clássico, começaremos a falar de calor e trabalho em sistemas quânticos exigindo que a primeira lei da termodinâmica seja válida independente de como essas grandezas serão definidas posteriormente.

## 4.1 Definições termodinâmicas

Consideremos um sistema quântico e ambiente com hamiltonianos  $H_S(t)$  e  $H_E$  (independente do tempo) pertencentes à um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$  e que interagem através do hamiltoniano de interação  $V(t)$ . A energia interna do sistema é definida por

$$E(t) \equiv \text{Tr}\{\rho_T(t)[H_S(t) + V(t)]\} \quad (4.1)$$

Vários autores utilizam essa mesma definição apesar de que existem estudos que exploram outras definições alternativas. Em seções posteriores deste trabalho discutiremos outras possíveis definições da energia interna do sistema e mostraremos um resultado que indica que a definição 4.1 é consistente com a segunda lei da termodinâmica enquanto que outras definições conduzem à violações dessa lei. Sendo  $W(t)$  o trabalho realizado sobre o sistema no intervalo  $[0, t]$  e  $Q(t)$  o calor que fluiu para o sistema nesse mesmo intervalo, da primeira lei da termodinâmica temos que

$$\Delta E(t) = W(t) + Q(t) \quad (4.2)$$

Sendo o hamiltoniano dos banhos constante e usando a definição 4.1, em que a energia de interação está por completo contabilizada na energia do sistema, toda a variação de energia dos banhos só pode ser em forma de calor. Em vista disso, o calor que flui para o sistema é definido por

$$Q(t) \equiv -\text{Tr}\{H_E[\rho_T(t) - \rho_T(0)]\}, \quad (4.3)$$

ou seja, menos a variação da energia do ambiente. Juntas, as equações 4.2 e 4.3 implicam que o trabalho realizado sobre o sistema é dado por

$$W(t) = \text{Tr}[\rho_T(t)H_T(t) - \rho_T(0)H_T(0)] \quad (4.4)$$

Podemos também definir primeiramente a equação 4.4 com o argumento de que toda variação de energia do universo é em forma de trabalho e que esse trabalho é feito sobre o sistema de interesse, já que o ambiente é estático e só troca energia em forma de calor. Isso em conjunto com a primeira lei da termodinâmica leva à equação 4.3. Para o caso em que o ambiente é subdividido em várias partes que não interagem entre si, o calor total que flui para o sistema é simplesmente a soma das contribuições de cada um dos subambientes que podem ser calculadas cada uma através da equação 4.3.

Através de algumas manipulações, a expressão 4.4 pode tomar uma forma que será mais útil quando utilizarmos essas definições no RIP. Podemos escrever que

$$W(t) = \int_0^t dt' \frac{d}{dt'} \text{Tr} [\rho_T(t') H_T(t')] = \int_0^t dt' \frac{d}{dt'} \text{Tr} [\dot{\rho}_T H_T + \rho_T \dot{H}_T] \quad (4.5)$$

Como  $\text{Tr}[\dot{\rho}_T H_T] = -i \text{Tr}\{[\rho_T, H_T] H_T\} = 0$ , segue que

$$W(t) = \int_0^t dt' \text{Tr} [\rho_T(\dot{H}_S + \dot{V})] \quad (4.6)$$

## 4.2 Calor e trabalho no protocolo RI

A partir das definições feitas na seção anterior, podemos obter o calor e trabalho por unidade de tempo inseridos em um sistema sujeito ao RIP. Estudaremos os fluxos de energia, calor e trabalho do ambiente para o sistema durante um intervalo  $\tau$  característico do RIP: consideremos um sistema tal qual o estudado na seção 3.2 onde o sistema interage através do RIP com  $N$  banhos cujos estados iniciais de cada etapa do RIP são estados de Gibbs. No intervalo  $[n\tau, (n+1)\tau]$  a quantidade de calor inserida no sistema pelo  $n$ -ésimo banho é dada por <sup>1</sup>

$$\Delta Q_r = -(\langle H_r^n \rangle_\tau - \langle H_r^n \rangle_0) \quad (4.7)$$

onde  $\langle H_r^n \rangle_t = \text{Tr}_E \{H_r \rho_{E_r}^n(t)\}$  e  $\rho_{E_r}^n(t) = \text{Tr}_S \{e^{-iH_T t} \rho_S(n\tau) \otimes \omega_{\beta_r} e^{iH_T t}\}$ . Utilizando a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff, temos que

$$\begin{aligned} \langle H_r^n \rangle_\tau &= \langle H_r^n \rangle_0 + i\tau^{1/2} \text{Tr}_S \left\{ \rho_S(n\tau) \text{Tr}_E \left\{ [v_r^n, H_r] \omega_{\beta_r} \right\} \right\} \\ &\quad - \frac{\tau}{2} \text{Tr}_S \left\{ \rho_S(n\tau) \text{Tr}_E \left\{ [v_r^n, [v_r^n, H_r]] \omega_{\beta_r} \right\} \right\} + O(\tau^{3/2}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Tal como na equação 3.18, restringiremos o tipo de interação sistema-ambiente para  $v_r = \sum_k g_{rk} (A_{rk} L_{rk}^\dagger + A_{rk}^\dagger L_{rk})$ , de forma que o termo proporcional à  $\tau^{1/2}$  se anula, pois  $\langle [H_r, A_{rk}] \rangle = -\omega_{rk} \langle A_{rk} \rangle = 0$ . Segue disso que

$$\Delta Q_r = \frac{\tau}{2} \text{Tr}_S \left\{ \rho_S(n\tau) \text{Tr}_E \left\{ [v_r^n, [v_r^n, H_r]] \omega_{\beta_r} \right\} \right\} + O(\tau^{3/2}) \quad (4.9)$$

<sup>1</sup> Estamos aqui utilizando os operadores definidos na seção 3.2

Fazendo  $\dot{Q}_r = \lim_{\tau \rightarrow 0} \Delta Q_r / \tau$  temos

$$\begin{aligned} \dot{Q}_r &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ [v_r, [v_r, H_r]] \rho_S \otimes \omega_{\beta_r} \right\} = - \text{Tr} \left\{ \left( v_r H_r v_r - \frac{1}{2} \{v_r^2, H_r\} \right) \rho_S \otimes \omega_{\beta_r} \right\} \\ &= \sum_k \omega_{rk}^E \left( \gamma_{rk}^+ \langle L_{rk} L_{rk}^\dagger \rangle - \gamma_{rk}^- \langle L_{rk}^\dagger L_{rk} \rangle \right) \equiv \sum_r \omega_{rk}^E \dot{q}_{rk} \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde as taxas  $\gamma_{rk}^\pm$  foram definidas na equação 3.15 e fizemos  $\dot{q}_{rk} = \gamma_{rk}^+ \langle L_{rk} L_{rk}^\dagger \rangle - \gamma_{rk}^- \langle L_{rk}^\dagger L_{rk} \rangle$ .

No contexto do RIP estamos interessados na variação da energia interna do sistema  $[n\tau, (n+1)\tau)$ . Para calcular o trabalho realizado sobre o sistema em uma etapa do RIP precisamos levar em conta efeitos de borda devido à dependência temporal da interação  $V(t)$ , e portanto estudaremos o intervalo  $[n\tau - \epsilon, (n+1)\tau - \epsilon)$  no limite em que  $\epsilon \rightarrow 0$  para contabilizar a contribuição na variação da energia do sistema devido ao ato de “ligar e desligar” a interação com os sistemas auxiliares do RIP. Dito isso, o trabalho feito sobre o sistema em uma etapa do RIP é dado por:

$$\Delta W = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{n\tau - \epsilon}^{(n+1)\tau - \epsilon} dt \text{Tr} \{ \rho_T(t) \dot{V}(t) \} \quad (4.11)$$

lembrando que a dependência temporal da interação é por conta da existência de funções degrau 3.3, segue que, no intervalo de interesse da integral,  $\dot{V} = \delta(t - n\tau)(V_n - V_{n-1})$  e, portanto

$$\Delta W = \text{Tr} \{ \rho_T(n\tau) (V_n - V_{n-1}) \} \quad (4.12)$$

Para as interações que estamos considerando  $\text{Tr} \{ V_n \rho_T(n\tau) \} = 0$  pois até o instante  $n\tau$  o  $n$ -ésimo ambiente permanece no estado de Gibbs e as interações tem a forma 3.18. Após esse instante o ambiente pode sair do equilíbrio, de forma que podemos ter  $\text{Tr} \{ V_n \rho_T[(n+1)\tau] \} \neq 0$ . Segue então que

$$\begin{aligned} \Delta W &= \sum_r \Delta W_r = - \sum_r \frac{\langle v_r^{n-1} \rangle_{n\tau}}{\sqrt{\tau}} = - \sum_r \text{Tr} \left\{ \frac{v_r^{n-1}}{\sqrt{\tau}} e^{-iH_T \tau} \rho_S[(n-1)\tau] \otimes \rho_E^{n-1} e^{iH_T \tau} \right\} \\ &= - \sum_r \text{Tr} \left\{ \left( \frac{v_r^{n-1}}{\sqrt{\tau}} + i\tau^{1/2} [v_r^{n-1}, H_S + H_r] + \frac{\tau}{2} [v_r^{n-1}, [v_r^{n-1}, H_S + H_r]] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + O(\tau^{3/2}) \right) \rho_S[(n-1)\tau] \otimes \rho_E^{n-1} \right\} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Novamente o termo proporcional à  $\tau^{1/2}$  se anula devido à escolha da interação e ao fato de que o ambiente no início de cada etapa do RIP está em um estado de Gibbs. Fazendo

$\dot{W} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \Delta W / \tau$  resulta em

$$\begin{aligned}
\dot{W} &= -\frac{1}{2} \sum_r \text{Tr} \left\{ [v_r, [v_r, H_S + H_r]] \rho_S \otimes \omega_{\beta_r} \right\} = \text{Tr} \left\{ \left( v_r (H_S + H_r) v_r - \frac{1}{2} \{v_r^2, H_S + H_r\} \right) \rho_S \otimes \omega_{\beta_r} \right\} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_r \text{Tr} \left\{ \left[ v_r, \sum_k g_{rk} (\omega_{rk}^E - \omega_{rk}^S) [L_{rk}^\dagger A_{rk} - A_{rk}^\dagger L_{rk}] + [v_r, H_I] \right] \rho_S \otimes \omega_{\beta_r} \right\} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_k g_{rk} \left\{ (\omega_{rk}^E - \omega_{rk}^S) \text{Tr} \left\{ [v_r, L_{rk}^\dagger A_{rk} - A_{rk}^\dagger L_{rk}] \rho_S \otimes \omega_{\beta_r} \right\} \right. \\
&\quad \left. + \text{Tr} \left\{ [v_r, A_{rk} [L_{rk}^\dagger, H_I] + A_{rk}^\dagger [L_{rk}, H_I]] \rho_S \otimes \omega_{\beta_r} \right\} \right\} \\
&= \frac{1}{2} \sum_r \left( \gamma_{rk}^- \langle L_{rk}^\dagger F_{rk} + F_{rk}^\dagger L_{rk} \rangle - \gamma_{rk}^+ \langle F_{rk} L_{rk}^\dagger - L_{rk} F_{rk}^\dagger \rangle \right) + \sum_r (\omega_{rk}^S - \omega_{rk}^E) \dot{q}_{rk} \quad (4.14)
\end{aligned}$$

onde fizemos que  $F_{rk} = [H_I, L_{rk}]$ .

Como adiantamos ao escrever as equações 3.24 e 3.25, a realização de trabalho no sistema devido à interação com o ambiente externo está intimamente relacionada com a possível não-comutação das diferentes partes do hamiltoniano do sistema com o hamiltoniano de interação. Dois fatores que aparecem na expressão de  $[H_S + H_E, V]$  contribuem separadamente para realização de trabalho no sistema: a diferença entre os conjuntos de possíveis transições energéticas no sistema e ambiente e a não-comutação do hamiltoniano de interações internas dos subsistemas com a interação do sistema-ambiente.

### 4.3 Definições alternativas da energia interna

Tal como falamos na seção anterior, existem algumas outras definições alternativas para a energia interna do sistema e *a priori* não existe uma definição preferencial. As motivações para se escolher uma ou outra definição são todas *a posteriori*, de acordo com os resultados obtidos ao se fazer a escolha. A principal arbitrariedade na definição da energia interna se dá quando a energia de interação entre o ambiente e o sistema não pode ser desprezado, como se faz frequentemente em sistemas clássicos. Em um gás contido em um recipiente a interação ocorre somente nas paredes do recipiente que tem, matematicamente, volume nulo e portanto a energia contida nas paredes do recipiente acaba sendo desprezível se comparada à contida no volume do recipiente. E quando essa energia não é desprezível, de quem é a energia de interação? Do sistema ou do ambiente? Ou de nenhum dos dois?

Seja  $\alpha \in [0, 1]$ . Definimos, de forma alternativa, a energia interna do sistema como

$$E(t) \equiv \text{Tr}\{\rho_T(t)[H_S(t) + \alpha V(t)]\} \quad (4.15)$$

repare que recuperamos a definição anterior quando  $\alpha = 1$ .

Novamente, no contexto do RIP, para levar em conta efeitos de borda devido à dependência temporal de  $V(t)$  estudaremos a variação da energia no intervalo  $[n\tau - \epsilon, (n+1)\tau - \epsilon]$  no limite em que  $\epsilon \rightarrow 0$ . Segue que

$$\begin{aligned} \Delta E &= \text{Tr} \left\{ [H_S + \alpha V[(n+1)\tau - \epsilon]] \rho_T[(n+1)\tau - \epsilon] - [H_S + \alpha V(n\tau - \epsilon)] \rho_T(n\tau - \epsilon) \right\} \\ &= \Delta H_S + \alpha \Delta V \end{aligned} \quad (4.16)$$

Lembrando que  $\Delta H_S = \Delta H_T - \Delta H_E - \Delta V$  e da primeira lei da termodinâmica, segue que

$$\Delta E = \Delta H_T - \Delta H_E - (1 - \alpha)\Delta V = Q_S + W_S \quad (4.17)$$

onde  $Q_S$  é o calor inserido no sistema e  $W_S$  o trabalho realizado sobre o sistema. Fazendo agora a identificação de que a variação da energia do universo, que é um sistema fechado, tem de ser em forma de trabalho, temos que  $\Delta H_T = W_T = W_S + W_E$ , onde  $W_E$  é o trabalho realizado sobre o ambiente. Em conjunto com a equação anterior, implica que

$$Q_S = -\Delta H_E + W_E - (1 - \alpha)\Delta V \quad (4.18)$$

Agora precisamos saber como calcular  $W_S$  e  $W_E$ . No intervalo  $[n\tau - \epsilon, (n+1)\tau - \epsilon]$  sabemos da equação 4.11 que

$$\begin{aligned} W_T = W_S + W_E &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{n\tau - \epsilon}^{(n+1)\tau - \epsilon} dt \langle \dot{V}(t) \rangle \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \alpha \int_{n\tau - \epsilon}^{n\tau + \epsilon} dt \langle \dot{V}(t) \rangle + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (1 - \alpha) \int_{n\tau - \epsilon}^{n\tau + \epsilon} dt \langle \dot{V}(t) \rangle \end{aligned} \quad (4.19)$$

De forma a manter a consistência com o caso estudado anteriormente, identificamos o primeiro termo da igualdade acima como o trabalho realizado sobre o sistema e o segundo termo como o trabalho realizado sobre o ambiente. Lembrando que, no intervalo de interesse da integral,  $\dot{V} = \delta(t - n\tau)(V_n - V_{n-1})$ , resulta que

$$W_S + W_E = \alpha \text{Tr}\{\rho_T(n\tau)(V_n - V_{n-1})\} + (1 - \alpha) \text{Tr}\{\rho_T(n\tau)(V_n - V_{n-1})\} \quad (4.20)$$

então  $W_S = \alpha \text{Tr}\{\rho_T(n\tau)(V_n - V_{n-1})\}$  e, retornando à expressão 4.18,

$$\begin{aligned} Q_S &= -\Delta H_E - (1 - \alpha) \text{Tr} \left\{ \rho_T[(n+1)\tau - \epsilon] V_n - \rho_T(n\tau - \epsilon) V_{n-1} \right\} + (1 - \alpha) \text{Tr} \left[ \rho_T(n\tau)(V_n - V_{n-1}) \right] \\ &\stackrel{\epsilon \rightarrow 0}{=} -\Delta H_E - (1 - \alpha) \text{Tr} \left\{ V_n(\rho_T[(n+1)\tau]) - \rho_T(n\tau) \right\} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Utilizando novamente que  $\text{Tr}(V_n \rho_E^n) = 0$  e retomando os resultados da expressão 4.14, o calor inserido no sistema é dado por

$$\begin{aligned} Q_S &= \frac{\tau}{2} \langle [v_n, [v_n, H_E]] - (1 - \alpha)[v_n, [v_n, H_S + H_E]] \rangle_{n\tau} + O(\tau^{3/2}) \\ &= \frac{\tau}{2} \langle [v_n, [v_n, \alpha H_E - (1 - \alpha)H_S]] \rangle_{n\tau} + O(\tau^{3/2}) \end{aligned} \quad (4.22)$$

expressão que generaliza a 4.9.

Voltando à equação 4.20 e utilizando os resultados da expressão 4.14, o trabalho feito sobre o sistema é dado por

$$W_S = -\alpha \text{Tr}[\rho_T(n\tau)V_{n-1}] = -\alpha \frac{\tau}{2} \langle [v_{n-1}, [v_{n-1}, H_S + H_E]] \rangle_{(n-1)\tau} + O(\tau^{3/2}) \quad (4.23)$$

Temos, portanto, que

$$\begin{aligned} \Delta E &= Q_S + W_S \\ &= \frac{\tau}{2} \left\{ \langle [v_n, [v_n, \alpha H_E - (1 - \alpha)H_S]] \rangle_{n\tau} - \alpha \langle [v_{n-1}, [v_{n-1}, H_S + H_E]] \rangle_{(n-1)\tau} \right\} + O(\tau^{3/2}) \end{aligned} \quad (4.24)$$

Seja  $\dot{E}_{RIP}$  a variação temporal da energia do sistema obtida através do RIP. Fazendo  $\dot{E}_{RIP} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \Delta E / \tau$ , segue que

$$\begin{aligned} \dot{E}_{RIP} &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ [[v, [v, \alpha(H_E + H_S) - \alpha(H_E + H_S) - H_S]]] \rho_S \otimes \rho_E \right\} \\ &= -\frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ [[v, [v, H_S]]] \rho_S \otimes \rho_E \right\} \end{aligned} \quad (4.25)$$

Ou seja, mostramos que a variação da energia total do sistema independe do valor de  $\alpha$ , independe da definição feita de energia interna que, por argumentos físicos e matemáticos, nos conduziram às definições de calor e trabalho dependentes do parâmetro  $\alpha$ .

## 4.4 Consistência com a equação de Lindblad

Através da equação de Lindblad 3.2, uma equação que nos dá informação somente sobre o estado do sistema, podemos calcular a variação da energia deste:

$$\dot{E}_{LB} = \frac{d}{dt} \langle H_S \rangle = \text{Tr}_S(H_S \dot{\rho}_S) = \text{Tr}_S \left\{ H_S [-i[H_S, \rho_S] + \mathcal{D}(\rho_S)] \right\} = \text{Tr}_S[H_S \mathcal{D}(\rho_S)] \quad (4.26)$$

Mostraremos agora que  $\dot{E}_{RIP} = \dot{E}_{LB}$ , onde  $\dot{E}_{LB}$  é a variação da energia do sistema que pode ser calculada através da equação de Lindblad, sem fazer nenhuma referência ao processo pelo qual o sistema passou. Através da equação 3.9, pode-se ver que o termo que dá origem ao dissipador na equação de Lindblad é exatamente o termo que envolve  $[v, [v, \rho]]$  e que é proporcional à  $\tau$ , ou seja,

$$D(\rho_S) = -\frac{1}{2} \text{Tr}_E [v, [v, \rho_S \otimes \rho_E]] \quad (4.27)$$

por conseguinte

$$\begin{aligned} \dot{E}_{LB} &= \text{Tr}_S \left\{ H_S \left( -\frac{1}{2} \text{Tr}_E [v, [v, \rho_S \otimes \rho_E]] \right) \right\} = \text{Tr}_S \left\{ H_S \text{Tr}_E \left( v \rho_S \otimes \rho_E v - \frac{1}{2} \{v^2, \rho_S \otimes \rho_E\} \right) \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ H_S \left( v \rho_S \otimes \rho_E v - \frac{1}{2} \{v^2, \rho_S \otimes \rho_E\} \right) \right\} = \text{Tr} \left\{ \left( v H_S v - \frac{1}{2} \{v^2, H_S\} \right) \rho_S \otimes \rho_E \right\} \\ &= -\frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ [[v, [v, H_S]]] \rho_S \otimes \rho_E \right\} = \dot{E}_{RIP} \end{aligned} \quad (4.28)$$

onde usamos a invariância cíclica do traço na última igualdade.

Mostramos então que independente de como fizemos a separação da energia de interação então o balanço energético continua consistente com a informação que se é possível obter através da equação de Lindblad. Além disso, a demonstração foi feita para hamiltonianos do sistema, e do ambiente arbitrários desde que o universo seja submetido ao RIP e que a interação tenha a forma 3.18. Esse resultado generaliza o obtido em [REF] que demonstra essa consistência numa cadeia de spins XXZ com escolha específica da energia interna.

## 5 Produção de entropia

Consideremos um sistema quântico acoplado à um ambiente inicialmente em um estado de Gibbs com temperatura inversa  $\beta$  e hamiltoniano  $H_E$  independente do tempo. Seja  $H_S(t)$  o hamiltoniano do sistema e  $V(t)$  a interação sistema-banho. O estado quântico do universo evolui unitariamente da seguinte forma

$$\rho(t) = U(t, 0)\rho(0)U^\dagger(t, 0) \quad , \quad U(t, 0) = e^{-iH_T t} \quad (5.1)$$

onde  $H_T = H_S + H_E + V$ . Assumiremos que o estado inicial é descorrelacionado, ou seja,

$$\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \frac{e^{-\beta H_E}}{Z_E} \equiv \rho_S(0) \otimes \rho_E^\beta. \quad (5.2)$$

A entropia de Von Neumann do sistema é dada por

$$S(t) = -\text{Tr}\{\rho_S(t) \ln \rho_S(t)\} \quad (5.3)$$

onde é feito o traço sobre o ambiente do estado do universo para se obter o estado reduzido do sistema:  $\rho_S(t) = \text{Tr}_E \rho(t)$ . Lembrando que a entropia de Von Neumann é invariante sob transformações unitárias, segue que:

$$\begin{aligned} S_T(t) &= -\text{Tr}\{\rho(t) \ln \rho(t)\} = -\text{Tr}\{\rho(0) \ln \rho(0)\} \\ &= -\text{Tr}_S \rho_S(0) \ln \rho_S(0) - \text{Tr}_E \rho_E^\beta \ln \rho_E^\beta \\ &= S(0) + S_E(0) \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde foi usado que o estado inicial do universo é descorrelacionado e  $S_E(t)$  é a entropia de Von Neumann do ambiente no tempo  $t$ . Podemos avaliar a variação na entropia do sistema aproveitando da invariância da entropia do universo, pois  $S(0) = S_T(t) - S_E(0)$  e, portanto,

$$\Delta S(t) = S(t) - S(0) = S(t) - S_T(t) + S_E(0) \quad (5.5)$$

$$= -\text{Tr}_S \rho_S(0) \ln \rho_S(0) + \text{Tr}\{\rho(t) \ln \rho(t)\} - \text{Tr}_E \rho_E^\beta \ln \rho_E^\beta$$

Somando e subtraindo  $\text{Tr}\{\rho(t) \ln \rho_E^\beta\}$  temos que

$$\begin{aligned} \Delta S(t) &= -\text{Tr}_S \rho_S(0) \ln \rho_S(0) + \text{Tr}\{\rho(t) \ln \rho(t)\} - \text{Tr}_E \rho_E^\beta \ln \rho_E^\beta \\ &\quad + \text{Tr}\{\rho(t) \ln \rho_E^\beta - \rho(t) \ln \rho_E^\beta\} \\ &= -\text{Tr}\{\rho(t) \ln \rho_S(t) \rho_E^\beta\} + \text{Tr}\{\rho(t) \ln \rho(t)\} + \text{Tr}_E \{(\rho_E(t) - \rho_E^\beta) \ln \rho_E^\beta\} \end{aligned} \quad (5.6)$$

Como  $\rho_E^\beta = e^{-\beta H_E}/Z_E$  e, da mecânica estatística de equilíbrio, sabemos que  $\ln Z = -\beta(\langle H \rangle - TS)$ , segue que:

$$\ln \rho_E^\beta = -\beta H_E - \ln Z_E = -\beta H_E + \beta \langle H \rangle_0 - S_E(0) \quad (5.7)$$

Podemos então avaliar o último termo da expressão para a variação da entropia do sistema:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_E \left\{ (\rho_E(t) - \rho_E^\beta) \ln \rho_E^\beta \right\} &= \text{Tr}_E \left\{ \rho_E(t) \left( -\beta H_E + \beta \langle H_E \rangle_0 - S_E(0) \right) - \rho_E^\beta \ln \rho_E^\beta \right\} \\ &= S_E(0) - S_E(0) - \beta \left( \langle H_E \rangle_t - \langle H_E \rangle_0 \right) \\ &= -\beta \left( \langle H_E \rangle_t - \langle H_E \rangle_0 \right) = \beta Q, \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde definimos o calor que sai do ambiente e entra no sistema  $Q \equiv \langle H_E \rangle_0 - \langle H_E \rangle_t$  como a menos a variação da energia média do ambiente, ou seja, dessa forma fica implícito que toda troca de energia do ambiente é somente em forma de calor. Daí conclui-se que caso trabalho seja feito sobre o universo devido à dependência temporal da interação  $V(t)$ , esse trabalho é feito sobre o sistema. Retornando à expressão para a variação da entropia do sistema, temos que

$$\Delta S(t) = \beta Q + \text{Tr} \left\{ \rho(t) \left( \ln \rho(t) - \ln \rho_S(t) \rho_E^\beta \right) \right\} \quad (5.9)$$

Introduzimos agora a entropia relativa (ou divergência de Kullback-Leibler)  $\mathcal{D}[\rho||\sigma] \equiv \text{Tr}\{\rho(\ln \rho - \ln \sigma)\}$ , que tem algumas propriedades interessantes, como o fato de ser uma função não-negativa e igual a zero se, somente se, as matrizes  $\rho$  e  $\sigma$  forem idênticas. Introduzimos também a informação mútua  $I_{X:Y}(t) \equiv S_X(t) + S_Y(t) - S_{XY}(t) \geq 0$ , que mede as correlações entre  $X$  e  $Y$  e pode também ser escrita da forma  $I_{X:Y} = \mathcal{D}[\rho_{XY}||\rho_X\rho_Y]$ . Usaremos essas definições já consolidadas na literatura para fazer algumas manipulações e

identificar distintas contribuições na variação da entropia do sistema:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}\left\{\rho(t)\left(\ln \rho(t) - \ln \rho_S(t)\rho_E^\beta\right)\right\} &= \mathcal{D}[\rho(t)||\rho_S(t)\rho_E^\beta] \\
&= -\text{Tr}\{\rho(t) \ln \rho_S(t)\} - \text{Tr}\{\rho(t) \ln \rho_E^\beta\} - S_T(t) \\
&= S(t) - \text{Tr}_E\{\rho_E(t) \ln \rho_E^\beta\} - S_T(t) \\
&= S(t) - \text{Tr}_E\{\rho_E(t)\left(\ln \rho_E(t) - \ln \rho_E(t) + \ln \rho_E^\beta\right)\} - S_T(t) \\
&= S(t) + S_E(t) - S_T(t) + \mathcal{D}[\rho_E(t)||\rho_E^\beta] \\
&= I_{S:E} + \mathcal{D}[\rho_E(t)||\rho_E^\beta]
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Podemos reescrever a variação da entropia do sistema da seguinte forma:

$$\Delta S(t) = \beta Q + \mathcal{D}[\rho(t)||\rho_S(t)\rho_E^\beta] = \beta Q + I_{S:E} + \mathcal{D}[\rho_E(t)||\rho_E^\beta] \tag{5.11}$$

Quando um sistema qualquer passa por um processo arbitrário a variação de entropia desse sistema pode ser separada em duas partes, uma devido à ocorrência de processos reversíveis e a outra devido à processos irreversíveis:

$$\Delta S(t) = \Delta_i S(t) + \Delta_e S(t) \tag{5.12}$$

onde  $\Delta_e S(t)$  é o fluxo de entropia para o sistema, que é a contribuição para a variação da entropia devido aos processos reversíveis, e  $\Delta_i S(t)$  a produção de entropia que caracteriza a irreversibilidade temporal do processo ocorrido. Esposito et al. fazem a seguinte identificação:  $\Delta_e S(t) = \beta Q$  e portanto  $\Delta_i S(t) = \mathcal{D}[\rho(t)||\rho_S(t)\rho_E^\beta] = \mathcal{D}[\rho_E(t)||\rho_E^\beta] + I_{S:E}$ . Ou seja, para que não haja produção de entropia o estado do sistema no tempo  $t$  tem de ser descorrelacionado do ambiente e o estado do ambiente não pode ter se modificado, nem mesmo passar por estados sucessivos de equilíbrio.

Façamos um breve estudo sobre a produção de entropia  $\Delta_i S$ . Para isso consideraremos dois casos separados para que o significado dos termos fique mais claro:

1.  $\rho_E(t) = \rho_E^\beta$  e  $I_{S:E} \neq 0 \implies \Delta_i S(t) = I_{S:E}$

Definindo  $S_I(t) \equiv S_T(t) - S(t) - S_E(t)$ , que pode ser visto como uma espécie

de entropia contida nas correlações entre o sistema e o ambiente, segue que:

$$\begin{aligned}
S_I(t) &= S(0) + S_E(0) - S(t) - S_E(t) \\
&= S(0) + S_E(t) - S(t) - S_E(t) \\
&= -\Delta S(t) \\
&= \beta \left( \langle H_E \rangle_t - \langle H_E \rangle_0 \right) - I_{S:E}(t) \\
&= -I_{S:E}(t) \leq 0
\end{aligned} \tag{5.13}$$

onde foram usadas a hipótese que o estado do reservatório não se altera, a equação 5.11 e a positividade da informação mútua. Das manipulações acima conclui-se que a entropia do sistema aumenta em um processo do tipo 1. sempre devido à produção de entropia, visto que, devido às premissas adotadas, o fluxo de calor é nulo para o reservatório. Ao mesmo tempo surgem correlações entre o sistema e banho com “entropia negativa” tal que a entropia do universo se conserve.

2.  $I_{S:E}(t) = 0$  e  $\rho_E(t) \neq \rho_E^\beta \implies \rho(t) = \rho_S(t)\rho_E(t)$  e  $S_I(t) = 0$

Sob a hipótese acima a expressão para a produção de entropia é dada por:

$$\begin{aligned}
\Delta_i S(t) &= \mathcal{D}[\rho_E(t) || \rho_E^\beta] \\
&= \text{Tr}_E \left\{ \rho_E(t) (\ln \rho_E(t) - \ln \rho_E^\beta) \right\} \\
&= \text{Tr}_E \left\{ \rho_E(t) (\ln \rho_E(t) - \ln \rho_E^\beta) + \rho_E^\beta \ln \rho_E^\beta - \rho_E^\beta \ln \rho_E^\beta \right\} \\
&= \text{Tr}_E \left\{ \rho_E(t) \ln \rho_E(t) - \rho_E^\beta \ln \rho_E^\beta \right\} - \text{Tr}_E \left\{ (\rho_E(t) - \rho_E^\beta) \ln \rho_E^\beta \right\} \\
&= -\Delta S_E - \beta Q
\end{aligned} \tag{5.14}$$

A variação da entropia do sistema é dada por:

$$\Delta S(t) = \Delta_i S(t) + \Delta_e S(t) = -\Delta S_E - \beta Q + \beta Q = -\Delta S_E \tag{5.15}$$

ou seja, a entropia do sistema varia na quantidade oposta da entropia reservatório tal que a entropia do universo se conserve.

Em alguns casos é viável calcular a taxa de produção de entropia ao invés da produção de entropia em si. Essa, por sua vez, mantém a propriedade de ser também não-negativa. A taxa de produção de entropia é dada por:

$$\Delta_i S = \Delta S - \sum_r \beta_r Q_r \implies \frac{d_i S}{dt} = \dot{S} - \sum_r \beta_r \dot{Q}_r \quad (5.16)$$

Calculemos  $\dot{S}$ . Seja  $\rho_S = \sum_k p_k |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|$ , onde  $\{|\Psi_k\rangle\}$  é base ortonormal. Portanto:

$$S = - \sum_k p_k \ln p_k \implies \frac{dS}{dt} = - \sum_k (\dot{p}_k \ln p_k + \dot{p}_k) \quad (5.17)$$

Lembrando que  $\rho_S$  obedece a equação de Lindblad (X) segue que:

$$\begin{aligned} \dot{p}_k &= \frac{d}{dt} \langle \Psi_k | \rho_S | \Psi_k \rangle \\ &= \left( \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi_k | \right) \rho_S | \Psi_k \rangle + \langle \Psi_k | \frac{d\rho_S}{dt} | \Psi_k \rangle + \langle \Psi_k | \rho_S \left( \frac{\partial}{\partial t} | \Psi_k \rangle \right) \\ &= i \langle \Psi_k | H_S \rho_S | \Psi_k \rangle - i \langle \Psi_k | [H_S, \rho_S] | \Psi_k \rangle + \langle \Psi_k | \mathcal{D}(\rho_S) | \Psi_k \rangle - i \langle \Psi_k | \rho_S H_S | \Psi_k \rangle \\ &= \langle \Psi_k | \mathcal{D}(\rho_S) | \Psi_k \rangle \end{aligned} \quad (5.18)$$

Logo:

$$\begin{aligned} \dot{S} &= - \sum_k \langle \Psi_k | \mathcal{D}(\rho_S) | \Psi_k \rangle \ln p_k + \text{Tr}_S \{ \mathcal{D}(\rho_S) \} \\ &= - \sum_k \langle \Psi_k | \mathcal{D}(\rho_S) | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | \ln \rho_S | \Psi_k \rangle + \text{Tr}_S \left\{ \frac{d\rho_S}{dt} + i[H_S, \rho_S] \right\} \\ &= - \sum_{k,j} \langle \Psi_k | \mathcal{D}(\rho_S) | \Psi_j \rangle \langle \Psi_j | \ln \rho_S | \Psi_k \rangle \\ &= - \sum_k \langle \Psi_k | \mathcal{D}(\rho_S) \ln \rho_S | \Psi_k \rangle = - \text{Tr}_S \{ \mathcal{D}(\rho_S) \ln \rho_S \} \end{aligned} \quad (5.19)$$

onde da terceira para quarta linha foi utilizado que  $\ln \rho_S$  é diagonal na base dos autoestados de  $\rho_S$ , que o traço de um comutador é nulo e que o traço de  $\rho_S$  constante igual a um. Retornando à expressão para a taxa de produção de produção de entropia temos:

$$\frac{d_i S}{dt} = - \text{Tr}_S \{ \mathcal{D}(\rho_S) \ln \rho_S \} - \sum_r \beta_r \dot{Q}_r \quad (5.20)$$

Para estados estacionários da equação de Lindblad  $\mathcal{D}(\rho_s) = i[H_S, \rho_s]$  e portanto:

$$\text{Tr}_S \{ \mathcal{D}(\rho_S) \ln \rho_S \} = i \text{Tr}_S \{ [H_S, \rho_S] \ln \rho_S \} = 0 \implies \frac{d_i S}{dt} = - \sum_r \beta_r \dot{Q}_r, \quad (5.21)$$

que é também evidente a partir da equação 5.16, pois no estado estacionário a variação da entropia do sistema é nula.

• **Demonstração que a entropia relativa é não-negativa**

Sejam  $\rho$  e  $\sigma$  operadores positivos tais que

$$\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i| \quad \text{e} \quad \sigma = \sum_i q_k |k\rangle\langle k| \quad (5.22)$$

com  $\{|i\rangle\}$  e  $\{|k\rangle\}$  bases ortonormais. Segue que:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\rho||\sigma) &= \text{Tr}\{\rho \ln \rho - \rho \ln \sigma\} = \sum_i p_i \ln p_i - \sum_i \langle i|\rho \ln \sigma|i\rangle \\ &= \sum_i p_i \ln p_i - \sum_i \langle i|\rho \left( \sum_k \ln q_k |k\rangle\langle k| \right) |i\rangle \\ &= \sum_i p_i \ln p_i - \sum_{i,k} p_i \ln q_k \langle i|k\rangle \langle k|i\rangle \\ &= \sum_i p_i \left( \ln p_i \sum_k P_{ik} \ln q_k \right) \end{aligned} \quad (5.23)$$

onde usamos que  $\ln \left( \sum_k q_k |k\rangle\langle k| \right) = \sum_k \ln q_k |k\rangle\langle k|$  e  $P_{ik} \equiv \langle i|k\rangle \langle k|i\rangle \geq 0$ . Além disso  $\sum_k P_{ik} = \sum_i P_{ik} = 1$ . Da concavidade da função logaritmo vale que  $\sum_k P_{ik} \ln q_k \leq \ln r_i$ , com  $r_i \equiv \sum_k P_{ik} q_k$ , e portanto:

$$\mathcal{D}(\rho||\sigma) \geq \sum_i p_i \ln \frac{p_i}{r_i} = -p_i \ln \frac{r_i}{p_i} \quad (5.24)$$

$$(5.25)$$

$$\geq -\ln \left( \sum_i p_i \frac{r_i}{p_i} \right) \quad (5.26)$$

$$(5.27)$$

$$= -\ln \left( \sum_i r_i \right) = -\ln 1 = 0 \quad (5.28)$$

Ou seja,  $\mathcal{D} \geq 0$ . Bastou que  $\rho$  e  $\sigma$  fossem operadores positivos. A desigualdade demonstrada é um caso particular da desigualdade de Klein.

## 6 Aplicação no XXZ

No presente capítulo mostraremos como as ideias descritas anteriormente podem ser aplicadas utilizando o modelo XXZ, que é um protótipo para diversos estudos nas áreas de informação quântica, mecânica estatística de equilíbrio e fora de equilíbrio e termodinâmica quântica. Em alguns casos, o modelo apresenta soluções simples que podem ser obtidas manualmente com algum esforço. Ademais, exibe interessantes efeitos e comportamentos como retificação e transições de fase. Mostraremos que, no contexto do RIP, o modelo pode funcionar em diferentes regimes de máquina térmica: motor, refrigerador e aquecedor. Além disso, apresentaremos um resultado que indica uma separação preferencial para energia interna entre o sistema e o banho no RIP. Caso seja interpretado que parte do trabalho necessário do agente externo para executar o protocolo é feito sobre o ambiente, então é possível que haja produção de entropia negativa, o que viola a segunda lei da termodinâmica.

### 6.1 Dinâmica do sistema e expressões para calor e trabalho

#### 6.1.1 Dinâmica do sistema

Consideremos um sistema XXZ de  $N$  spins sujeito ao RIP acoplado ao ambiente pelos spins da fronteira. Em cada intervalo do RIP o universo evoluirá unitariamente devido à ação do hamiltoniano total  $H_T = H_S + H_L + H_R + V_L + V_R$ , onde:

$$H_S = \sum_{i=1}^N \frac{h_i}{2} \sigma_i^z + \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_{i,i+1} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z; \quad (6.1)$$

$$V_L = \sqrt{\frac{\lambda_L}{\tau}} (\sigma_L^x \sigma_1^x + \sigma_L^y \sigma_1^y) \equiv \frac{v_L}{\sqrt{\tau}}; \quad (6.2)$$

$$V_R = \sqrt{\frac{\lambda_R}{\tau}} (\sigma_N^x \sigma_R^x + \sigma_N^y \sigma_R^y) \equiv \frac{v_R}{\sqrt{\tau}}; \quad (6.3)$$

$$H_r = \frac{h_r}{2} \sigma_r^z, \quad r = L, R \quad (6.4)$$

onde  $\sigma_i^x$ ,  $\sigma_i^y$  e  $\sigma_i^z$  são as matrizes de Pauli que atuam não trivialmente somente no  $i$ -ésimo spin. Sendo  $n$  um número inteiro e  $\tau$  o tempo de cada interação no RIP, o estado do sistema no instante  $n\tau$  é dado por:

$$\rho_S(n\tau) = \text{Tr}_n \left\{ e^{-iH_T\tau} \rho_S[(n-1)\tau] \otimes \rho_n e^{iH_T\tau} \right\} \quad (6.5)$$

onde o traço é feito sobre o  $n$ -ésimo ambiente. Utilizando a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff segue que:

$$\begin{aligned}
\rho_{S,n} &= \text{Tr}_n \left\{ \rho_{S,n-1} \otimes \rho_n - i\tau [H_T, \rho_{S,n-1} \otimes \rho_n] - \frac{\tau^2}{2} [H_T, [H_T, \rho_{S,n-1} \otimes \rho_n]] + \dots \right\} \\
&= \text{Tr}_n \left\{ \rho_{S,n-1} \otimes \rho_n - i\tau^{1/2} [v_L + v_R, \rho_{S,n-1} \otimes \rho_n] \right. \\
&\quad \left. - \tau \left( i[H_S + H_R + H_L, \rho_{S,n-1} \otimes \rho_n] + \frac{1}{2} [v_L + v_R, [v_L + v_R, \rho_{S,n-1} \otimes \rho_n]] \right) \right. \\
&\quad \left. + O(\tau^{3/2}) \right\} \tag{6.6}
\end{aligned}$$

onde foi denotado que  $\rho_S(n\tau) \equiv \rho_{S,n}$ . Avaliaremos os termos separadamente para simplificar a leitura.

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_n \{ [v_L, \rho_S \otimes \rho_n] \} &= \lambda_L^{1/2} \left[ \sigma_1^x \rho_S \text{Tr}_n \{ \sigma_L^x \rho_n \} + \sigma_1^y \rho_S \text{Tr}_n \{ \sigma_L^y \rho_n \} \right. \\
&\quad \left. - \rho_S \sigma_1^x \text{Tr}_n \{ \rho_n \sigma_L^x \} - \rho_S \sigma_1^y \text{Tr}_n \{ \rho_n \sigma_L^y \} \right] = 0 \tag{6.7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_n \{ [v_R, \rho_S \otimes \rho_n] \} &= \lambda_R^{1/2} \left[ \sigma_N^x \rho_S \text{Tr}_n \{ \sigma_R^x \rho_n \} + \sigma_N^y \rho_S \text{Tr}_n \{ \sigma_R^y \rho_n \} \right. \\
&\quad \left. - \rho_S \sigma_N^x \text{Tr}_n \{ \rho_n \sigma_R^x \} - \rho_S \sigma_N^y \text{Tr}_n \{ \rho_n \sigma_R^y \} \right] = 0 \tag{6.8}
\end{aligned}$$

pois como  $\rho_n$  é um estado de Gibbs, então  $\text{Tr}_n \{ \sigma_{L,R}^{x,y} \rho_n \} = 0$ . À vista disso, a equação 6.6 não contem termos de ordem  $\tau^{1/2}$ . Analisemos os termos de ordem  $\tau$ :

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_n \{ [H_S + H_R + H_L, \rho_S \otimes \rho_n] \} &= [H_S, \rho_S] + \rho_S \text{Tr}_n \{ [H_R, \rho_n] \} + \rho_S \text{Tr}_n \{ [H_L, \rho_n] \} \\
&= [H_S, \rho_S] \tag{6.9}
\end{aligned}$$

onde foi usado que o traço (total) de um comutador é nulo. Utilizando que  $v_L^2 = 2\lambda_L(1 - \sigma_L^z \sigma_1^z)$  temos:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_n\{[v_L, [v_L, \rho_S \otimes \rho_n]]\} &= \text{Tr}_n\{v_L^2 \rho_S \otimes \rho_n - 2v_L \rho_S \otimes \rho_n v_L + \rho_S \otimes \rho_n v_L^2\} \\
&= 2\lambda_L \text{Tr}_n \left\{ (1 - \sigma_L^z \sigma_1^z) \rho_S \rho_n + \rho_S \rho_n (1 - \sigma_L^z \sigma_1^z) - (\sigma_L^x \sigma_1^x + \sigma_L^y \sigma_1^y) \rho_S \rho_n (\sigma_L^x \sigma_1^x + \sigma_L^y \sigma_1^y) \right\} \\
&= 2\lambda_L \left[ 2\rho_S - (\sigma_1^z \rho_S + \rho_S \sigma_1^z) \text{Tr}_n\{\sigma_L^z \rho_n\} - \sigma_1^x \rho_S \sigma_1^x \text{Tr}_n\{\sigma_L^x \rho_n \sigma_L^x\} - \sigma_1^x \rho_S \sigma_1^y \text{Tr}_n\{\sigma_L^x \rho_n \sigma_L^y\} \right. \\
&\quad \left. - \sigma_1^y \rho_S \sigma_1^x \text{Tr}_n\{\sigma_L^y \rho_n \sigma_L^x\} - \sigma_1^y \rho_S \sigma_1^y \text{Tr}_n\{\sigma_L^y \rho_n \sigma_L^y\} \right] \\
&= 2\lambda_L \left[ 2\rho_S - \sigma_1^x \rho_S \sigma_1^x - \sigma_1^y \rho_S \sigma_1^y + i f_L (\sigma_1^x \sigma_1^y \rho_S + \rho_S \sigma_1^x \sigma_1^y + \sigma_1^x \rho_S \sigma_1^y - \sigma_1^y \rho_S \sigma_1^x) \right] \quad (6.10)
\end{aligned}$$

onde foi definido que  $f_L \equiv \text{Tr}_n\{\sigma_L^z \rho_n\} = -\tanh(\beta_L h_L)$  e foram usadas as regras de comutação usuais das matrizes de Pauli. Introduzindo os operadores escada  $\sigma_i^\pm = (\sigma_i^x \pm \sigma_i^y)/2$  segue que:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_n\{[v_L, [v_L, \rho_S \otimes \rho_n]]\} &= 2\lambda_L \left[ 2\rho_S - (\sigma_1^+ + \sigma_1^-) \rho_S (\sigma_1^+ + \sigma_1^-) + (\sigma_1^+ - \sigma_1^-) \rho_S (\sigma_1^+ - \sigma_1^-) \right. \\
&\quad \left. f_L ((\sigma_1^+ + \sigma_1^-) (\sigma_1^+ - \sigma_1^-) \rho_S + \rho_S (\sigma_1^+ + \sigma_1^-) (\sigma_1^+ - \sigma_1^-) + (\sigma_1^+ + \sigma_1^-) \rho_S (\sigma_1^+ - \sigma_1^-) \right. \\
&\quad \left. - (\sigma_1^+ - \sigma_1^-) \rho_S (\sigma_1^+ + \sigma_1^-) \right] \\
&= 2\lambda_L \left[ 2\rho_S - 2(\sigma_1^+ \rho_S \sigma_1^- + \sigma_1^- \rho_S \sigma_1^+) + 2f_L (\{\sigma_1^- \sigma_1^+, \rho_S\} - \{\sigma_1^+ \sigma_1^-, \rho_S\}) - 2\sigma_1^+ \rho_S \sigma_1^- \right. \\
&\quad \left. + 2\sigma_1^- \rho_S \sigma_1^+ \right] \\
&= -2\lambda_L \left[ (1 + f_L) (2\sigma_1^+ \rho_S \sigma_1^- - \{\sigma_1^- \sigma_1^+, \rho_S\}) + (1 - f_L) (2\sigma_1^- \rho_S \sigma_1^+ - \{\sigma_1^+ \sigma_1^-, \rho_S\}) \right] \\
&= -2\mathcal{D}_L(\rho_S) \quad (6.11)
\end{aligned}$$

onde foi definido o dissipador

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_L(\rho_S) &\equiv \lambda_L \left[ (1 + f_L) \left( 2\sigma_1^+ \rho_S \sigma_1^- - \{ \sigma_1^- \sigma_1^+, \rho_S \} \right) + (1 - f_L) \left( 2\sigma_1^- \rho_S \sigma_1^+ - \{ \sigma_1^+ \sigma_1^-, \rho_S \} \right) \right] \\ &= \sum_{k=\pm} \left( F_k^L \rho_S F_k^{L\dagger} - \frac{1}{2} \{ F_k^{L\dagger} F_k^L, \rho_S \} \right) \end{aligned} \quad (6.12)$$

com  $F_{\pm}^L = \sqrt{\frac{\lambda_L}{2}(1 \pm f_L)} \sigma_1^{\pm}$ . Similarmente, temos que:

$$\text{Tr}_n \{ [v_R, [v_R, \rho_S \otimes \rho_n]] \} = -2\mathcal{D}_R(\rho_S) \quad (6.13)$$

onde

$$\mathcal{D}_R(\rho_S) = \sum_{k=\pm} \left( F_k^R \rho_S F_k^{R\dagger} - \frac{1}{2} \{ F_k^{R\dagger} F_k^R, \rho_S \} \right) \quad (6.14)$$

com  $F_{\pm}^R = \sqrt{\frac{\lambda_R}{2}(1 \pm f_R)} \sigma_N^{\pm}$ . Além disso, segue que:

$$\text{Tr}_n \{ [v_L, [v_R, \rho_S \otimes \rho_n]] \} = 0 \quad (6.15)$$

pois cada termo do tipo  $\text{Tr}_n \{ v_R v_L \rho_n \} = \text{Tr}_{n,R} \{ v_R \omega_{\beta_R} \} \text{Tr}_{n,L} \{ v_L \omega_{\beta_L} \}$  se anula conforme foi demonstrado nas equações 6.7 e 6.8. Utilizando os resultados acima e retornando à equação para o estado quântico do sistema no instante de tempo  $n\tau$  temos:

$$\frac{\rho_{S,n} - \rho_{S,n-1}}{\tau} = -i[H_S, \rho_{S,n-1}] + \mathcal{D}_L(\rho_{S,n-1}) + \mathcal{D}_R(\rho_{S,n-1}) + O(\tau^{1/2}) \quad (6.16)$$

tomando o limite  $\tau \rightarrow 0$  obtemos a equação de Lindblad que rege o estado quântico do sistema:

$$\frac{d\rho_S}{dt} = -i[H_S, \rho_S] + \mathcal{D}_L(\rho_S) + \mathcal{D}_R(\rho_S) \quad (6.17)$$

### 6.1.2 Não unicidade da dinâmica de Lindblad

Gostaríamos agora de tocar em um ponto muito importante deste trabalho que, caso seja erroneamente analisado, pode levar à interpretações e conclusões não físicas para a dinâmica regida por equações de Lindblad locais. A mensagem relevante desta seção é que diferentes configurações do universo, ou seja, do hamiltoniano total  $H_T$  em conjunto com o estado inicial das unidades auxiliares em cada uma das interações no RIP, podem resultar na mesma equação de Lindblad para o sistema. Veremos ainda na seção posterior que, devido à essa não unicidade da equação de Lindblad, podemos ter valores diferentes de calor inserido e trabalho feito sobre um sistema sujeito à mesma equação de Lindblad, de acordo com a configuração do universo escolhida.

Como exemplo e objeto de pesquisa, consideremos o sistema descrito na subseção anterior, governado pela equação 6.17 e dissipadores dados pelas equações 6.12 e 6.14. De

maneira mais explícita, lembrando que  $f_L = -\tanh(\beta_L h_L/2)$ , o dissipador que atua no spin da esquerda é dado por:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_L(\rho_S) = \lambda_L \left[ (1 - \tanh(\beta_L h_L/2)) (2\sigma_1^+ \rho_S \sigma_1^- - \{\sigma_1^- \sigma_1^+, \rho_S\}) \right. \\ \left. + (1 + \tanh(\beta_L h_L/2)) (2\sigma_1^- \rho_S \sigma_1^+ - \{\sigma_1^+ \sigma_1^-, \rho_S\}) \right] \end{aligned} \quad (6.18)$$

Seja  $\beta'_L = \kappa_L \beta_L$  e  $h'_L = h_L/\kappa_L$ . O dissipador associado à esses novos valores de  $\beta_L$  e  $h_L$  é exatamente igual ao dissipador anterior:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}'_L(\rho_S) = \lambda_L \left[ (1 - \tanh(\beta_L h_L \kappa_L/2\kappa_L)) (2\sigma_1^+ \rho_S \sigma_1^- - \{\sigma_1^- \sigma_1^+, \rho_S\}) \right. \\ \left. + (1 + \tanh(\beta_L h_L \kappa_L/2\kappa_L)) (2\sigma_1^- \rho_S \sigma_1^+ - \{\sigma_1^+ \sigma_1^-, \rho_S\}) \right] = \mathcal{D}_L(\rho_S) \end{aligned} \quad (6.19)$$

isto é, se a temperatura associada ao estado inicial das unidades auxiliares em cada etapa do RIP e o campo magnético na direção  $z$  aplicado aos spins dessas unidades forem modificados de forma que  $f_L$  se mantenha fixo, segue que o dissipador associado à esse banho não sofrerá nenhuma modificação e, conseqüentemente, essa alteração no universo não resulta em um comportamento distinto do estado do sistema. A mesma análise pode ser feita para o dissipador  $\mathcal{D}_R(\rho_S)$  que atua do lado direito da cadeia de spins, fazendo  $\beta'_R = \kappa_R \beta_R$  e  $h'_R = h_R/\kappa_R$ .

Desta forma, ressaltamos que dado que um sistema obedece uma equação de Lindblad local, em geral não se pode afirmar qual o ambiente entrou em contato com o sistema e qual foi a dinâmica unitária sob a qual o universo ( $S + E$ ) evoluiu tal que, como resultado, o sistema fosse regido pela equação de Lindblad. À esse fato, nos referimos como a não unicidade da dinâmica de Lindblad local. Como adiantado no primeiro parágrafo desta subseção, diferentes configurações do universo podem estar associadas à também diferentes valores de calor inserido e trabalho realizado sobre o sistema. A partir disso, conclui-se que a equação de Lindblad não contém toda a informação relevante para o estudo da termodinâmica e dos fenômenos de transporte no contexto de sistemas quânticos abertos e, portanto, deve-se levar em conta a dinâmica do universo para se ter acesso à algumas grandezas fundamentais no análise da (ir)reversibilidade do processo, cálculo da performance ou rendimento da máquina, etc.

### 6.1.3 Expressões para calor e trabalho

A partir das expressões obtidas no capítulo 3 para o calor e trabalho feitos sobre o sistema submetido ao RIP, examinaremos os diversos regimes de funcionamento do XXZ: motor térmico, refrigerador e aquecedor. Tais regimes serão analisados considerando os banhos e interações sistema-banhos regidos pelos hamiltonianos expressos nas equações 6.1–6.4. Da equação 4.10, o calor que flui por unidade de tempo do  $r$ -ésimo reservatório para o sistema durante o intervalo  $\tau$  característico do RIP é dado por:

$$\dot{Q}_r = -\text{Tr} \left\{ \left( v_r H_r v_r - \frac{1}{2} \{v_r^2, H_r\} \right) \rho_S \otimes \omega_{\beta_r} \right\} \quad (6.20)$$

Para  $r = L$  temos:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_L &= -\lambda_L \text{Tr} \left\{ \left[ \frac{h_L}{2} (\sigma_L^x \sigma_1^x + \sigma_L^y \sigma_1^y) \sigma_L^z (\sigma_L^x \sigma_1^x + \sigma_L^y \sigma_1^y) - h_L (\sigma_L^z - \sigma_1^z) \right] \rho_S \otimes \omega_{\beta_L} \right\} \\ &= \lambda_L h_L \left[ (f_L - \langle \sigma_1^z \rangle) - \frac{1}{2} \text{Tr} \{ (\sigma_L^x \sigma_L^z \sigma_L^x + i \sigma_L^x \sigma_L^z \sigma_L^y \sigma_1^z - i \sigma_L^y \sigma_L^z \sigma_L^x \sigma_1^z + \sigma_L^y \sigma_L^z \sigma_L^y) \rho_S \otimes \omega_{\beta_L} \} \right] \\ &= \lambda_L h_L \left[ (f_L - \langle \sigma_1^z \rangle) - \text{Tr} \{ (\sigma_1^z - \sigma_L^z) \rho_S \otimes \omega_{\beta_L} \} \right] \\ &= 2\lambda_L h_L (f_L - \langle \sigma_1^z \rangle) \end{aligned} \quad (6.21)$$

Similarmente, para  $r = R$  temos que  $\dot{Q}_R = 2\lambda_R h_R (f_R - \langle \sigma_N^z \rangle)$  Para calcular o trabalho por unidade tempo realizado sobre o sistema em uma etapa do RIP devido à ação do agente externo associado ao  $r$ -ésimo ambiente utilizamos a expressão (X):

$$\dot{W}_r = \text{Tr} \left\{ \left[ v_r (H_S + H_r) v_r - \frac{1}{2} \{v_r^2, H_S + H_r\} \right] \rho_S \otimes \omega_{\beta_r} \right\} \quad (6.22)$$

para  $r = L$ , já usando que a contribuição devido aos termos do hamiltoniano do sistema

que comutam com  $v_L$  é nula, temos:

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left\{ \left[ v_r H_S v_r - \frac{1}{2} \{ v_r^2, H_S \} \right] \rho_S \otimes \omega_{\beta_r} \right\} &= \lambda_L \text{Tr} \left\{ \left[ v_L \left( \alpha_{1,2} (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + \Delta_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z + \frac{h_1}{2} \sigma_1^z \right) v_L \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \left\{ v_L^2, \alpha_{1,2} (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + \Delta_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z + \frac{h_1}{2} \sigma_1^z \right\} \right] \rho_S \otimes \omega_{\beta_L} \right\} \\
&= \lambda_L \text{Tr} \left\{ \left[ (\sigma_L^x \sigma_1^x + \sigma_L^y \sigma_1^y) \left( \alpha_{1,2} (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + \Delta_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z + \frac{h_1}{2} \sigma_1^z \right) (\sigma_L^x \sigma_1^x + \sigma_L^y \sigma_1^y) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \left\{ 1 - \sigma_L^z \sigma_1^z, \alpha_{1,2} (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + \Delta_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z + \frac{h_1}{2} \sigma_1^z \right\} \right] \rho_S \otimes \omega_{\beta_L} \right\} \\
&= \lambda_L \text{Tr} \left\{ \left[ \alpha_{1,2} (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_L^x \sigma_L^y \sigma_1^y \sigma_2^x + \sigma_1^x \sigma_1^y \sigma_1^x \sigma_2^y + \sigma_L^x \sigma_L^y \sigma_1^x \sigma_2^y + \sigma_L^y \sigma_L^x \sigma_1^y \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_1^x \sigma_1^y \sigma_2^x \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \sigma_L^y \sigma_L^x \sigma_1^x \sigma_2^y + \sigma_1^y \sigma_2^y) + (\sigma_1^x \sigma_1^z \sigma_1^x + \sigma_L^x \sigma_L^y \sigma_1^x \sigma_1^z \sigma_1^y + \sigma_L^y \sigma_L^x \sigma_1^y \sigma_1^z \sigma_1^x + \sigma_1^y \sigma_1^z \sigma_1^y) \left( \Delta_{1,2} \sigma_2^z + \frac{h_1}{2} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 2\alpha_{1,2} (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) - 2\Delta_{1,2} \sigma_1^z \sigma_2^z - h_1 \sigma_1^z + 2\Delta_{1,2} \sigma_L^z \sigma_2^z + h_1 \sigma_L^z \right] \rho_S \otimes \omega_{\beta_L} \right\} \\
&= \lambda_L \text{Tr} \left\{ \left[ \alpha_{1,2} (\sigma_1^x \sigma_2^x + i\sigma_L^z \sigma_1^y \sigma_2^x - \sigma_1^y \sigma_2^y + i\sigma_L^z \sigma_1^x \sigma_2^y - i\sigma_L^z \sigma_1^y \sigma_2^x - \sigma_1^x \sigma_2^x \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - i\sigma_L^z \sigma_1^x \sigma_2^y + \sigma_1^y \sigma_2^y - 2\sigma_1^x \sigma_2^x - 2\sigma_1^y \sigma_2^y) + 4\Delta_{1,2} (\sigma_L^z - \sigma_1^z) \sigma_2^z + 2h_1 (\sigma_L^z - \sigma_1^z) \right] \rho_S \otimes \omega_{\beta_L} \right\} \\
&= 2\lambda_L h_1 (f_L - \langle \sigma_1^z \rangle) + 4\lambda_L f_L \Delta_{1,2} \langle \sigma_2^z \rangle - 4\lambda_L \Delta_{1,2} \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle - 2\lambda_L \alpha_{1,2} \langle \sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y \rangle
\end{aligned} \tag{6.23}$$

O termo restante na expressão de  $\dot{W}_L$  é igual à  $-\dot{Q}_L$ . Fazendo uso da equação 6.21 segue que:

$$\dot{W}_L = 2\lambda_L \left[ (h_1 - h_L) (f_L - \langle \sigma_1^z \rangle) + 2\Delta_{1,2} (f_L \langle \sigma_2^z \rangle - \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle) - \alpha_{1,2} \langle \sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y \rangle \right] \tag{6.24}$$

Similarmente temos que

$$\begin{aligned} \dot{W}_R = 2\lambda_R \left[ (h_N - h_R)(f_R - \langle \sigma_N^z \rangle) + 2\Delta_{N-1,N} \left( f_R \langle \sigma_{N-1}^z \rangle - \langle \sigma_N^z \sigma_{N-1}^z \rangle \right) \right. \\ \left. - \alpha_{N-1,N} \langle \sigma_{N-1}^x \sigma_N^x + \sigma_{N-1}^y \sigma_N^y \rangle \right] \end{aligned} \quad (6.25)$$

A partir das expressões para a taxa com que calor flui para o sistema e a taxa com que é realizado trabalho sobre o sistema, foram feitas análises do estado estacionário da equação 6.17. Observamos diversos efeitos e obtivemos uma gama de resultados que explicitaremos nas próximas páginas. Para encontrar o estado estacionário da equação de Lindblad foi efetuado o procedimento descrito no apêndice A por meio *software* Mathematica<sup>®</sup>.

## 6.2 Resultados

Diversos resultados interessantes e inéditos foram obtidos. Essa diversidade é consequência de que foi possível através do *software* Mathematica<sup>®</sup> obter analiticamente o estado estacionário do sistema de interesse em função dos parâmetros do hamiltoniano total do universo. A quantidade de parâmetros livres variou em cada um dos estudos realizados. Quanto mais parâmetros livres mais livre fica o programador para depois testar valores específicos dos parâmetros e, possivelmente, observar efeitos e resultados relevantes.

### 6.2.1 N=3, h não-graded

Consideremos uma cadeia XXZ de três spins com hamiltoniano dado por

$$H_S = \frac{h}{2}\sigma_1^z + \frac{h}{2}\sigma_2^z + \frac{h}{2}\sigma_3^z + \alpha(\sigma_1^x\sigma_2^x + \sigma_1^y\sigma_2^y) + \alpha(\sigma_2^x\sigma_3^x + \sigma_2^y\sigma_3^y) + (\Delta + \delta)\sigma_1^z\sigma_2^z + (\Delta - \delta)\sigma_2^z\sigma_3^z \quad (6.26)$$

sujeita ao RIP com interações e hamiltoniano dos banhos dados pelas equações 6.2, 6.3 e 6.4. Com o intuito de reduzir o custo computacional, fazemos as escolhas de parâmetros, à princípio arbitrárias,  $\alpha = \delta = 1$ ,  $h = \Delta = 0$  e os parâmetros dos banhos  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ , calculamos o estado estacionário do sistema e, por conseguinte, as taxas de inserção de calor e realização de trabalho em ambos os lados da cadeia de spins:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_L = \left[ 2h_L(1521e^{\beta_L h_L} + 3562e^{2\beta_L h_L} + 1617e^{3\beta_L h_L} + 6419e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 3562e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} \right. \\ - 6419e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 1521e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} - 3562e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} - 1521e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} \\ - 1521e^{\beta_R h_R} - 3562e^{2\beta_R h_R} - 1617e^{3\beta_R h_R}) \left. \right] \left[ 12909e^{\beta_L h_L} + 12331e^{2\beta_L h_L} + 3993e^{3\beta_L h_L} \right. \\ + 37415e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 36829e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 12331e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 36829e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} \\ + 37415e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 12909e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 12331e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 12909e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} \\ \left. + 4563e^{3\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 12909e^{\beta_R h_R} + 12331e^{2\beta_R h_R} + 3993e^{3\beta_R h_R} + 4563 \right]^{-1} \end{aligned} \quad (6.27)$$

$$\begin{aligned}
\dot{Q}_R = & \left[ 2h_R(1521e^{\beta_L h_L} + 3562e^{2\beta_L h_L} + 1617e^{3\beta_L h_L} + 6419e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 3562e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} \right. \\
& - 6419e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 1521e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} - 3562e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} - 1521e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} \\
& - 1521e^{\beta_R h_R} - 3562e^{2\beta_R h_R} - 1617e^{3\beta_R h_R}) \left. \left[ 12909e^{\beta_L h_L} + 12331e^{2\beta_L h_L} + 3993e^{3\beta_L h_L} \right. \right. \\
& + 37415e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 36829e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 12331e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 36829e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} \\
& + 37415e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 12909e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 12331e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 12909e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} \\
& \left. \left. + 4563e^{3\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 12909e^{\beta_R h_R} + 12331e^{2\beta_R h_R} + 3993e^{3\beta_R h_R} + 4563 \right]^{-1} \right. \quad (6.28)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{W}_L = & \left[ 2(e^{\beta_L h_L} - e^{\beta_R h_R})(33(49h_L - 80)e^{3\beta_L h_L} + 13(391h_L - 240)e^{\beta_L h_L} + (5179h_L - 5600)e^{2\beta_L h_L} \right. \\
& + 16681h_L e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 16681h_L e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 1521h_L e^{3\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 13(391h_L \\
& - 240)e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 13(391h_L + 240)e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + (5179h_L - 5600)e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} \\
& + (5179h_L + 5600)e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + (16777h_L - 8240)e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + (16777h_L \\
& + 8240)e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 33(49h_L + 80)e^{3\beta_R h_R} + 13(391h_L + 240)e^{\beta_R h_R} + (5179h_L \\
& + 5600)e^{2\beta_R h_R} + 1521h_L) \left. \left[ (e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1)(121e^{\beta_L h_L} + 117e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 121e^{\beta_R h_R} \right. \right. \\
& + 117)(70e^{\beta_L h_L} + 33e^{2\beta_L h_L} + 136e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 70e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 70e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} \\
& \left. \left. + 39e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 70e^{\beta_R h_R} + 33e^{2\beta_R h_R} + 39) \right]^{-1} \right. \quad (6.29)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{W}_R = & - \left[ 2(e^{\beta_L h_L} - e^{\beta_R h_R})(16681h_R e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 16681h_R e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 1521h_R e^{3\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} \right. \\
& + 13(391h_R - 240)e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 13(391h_R + 240)e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + (5179h_R \\
& - 5600)e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} + (5179h_R + 5600)e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} \\
& + (16777h_R - 8240)e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + (16777h_R + 8240)e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 33(49h_R - 80)e^{3\beta_L h_L} \\
& + 13(391h_R - 240)e^{\beta_L h_L} + (5179h_R - 5600)e^{2\beta_L h_L} + 33(49h_R + 80)e^{3\beta_R h_R} + 13(391h_R \\
& + 240)e^{\beta_R h_R} + (5179h_R + 5600)e^{2\beta_R h_R} + 1521h_R) \left. \left[ (e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1)(121e^{\beta_L h_L} \right. \right. \\
& + 117e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 121e^{\beta_R h_R} + 117)(70e^{\beta_L h_L} + 33e^{2\beta_L h_L} + 136e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} \\
& \left. \left. + 70e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 70e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 39e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 70e^{\beta_R h_R} + 33e^{2\beta_R h_R} + 39) \right]^{-1} \right. \quad (6.30)
\end{aligned}$$

O primeiro resultado que queremos mostrar é a existência de diversos regimes de funcionamento do sistema dependendo da escolha de parâmetros do universo.

Na ideia de ciclo termodinâmico está implícita a necessidade de que um sistema, após sofrer um dado processo, tem de retornar ao estado inicial no final do processo para que seja caracterizado um ciclo. Como dito no parágrafo inicial desta seção, nossos resultados são calculados no estado estacionário da equação de Lindblad que rege o sistema e portanto a noção de ciclo termodinâmico se aplica apesar de que o ciclo estudado, no contexto do RIP, tem duração  $\tau \rightarrow 0$ . Aproveitando da discretização feita no RIP, as quantidades relevantes para nosso estudo, naturalmente, são o calor inserido no sistema e

o trabalho feito sobre este em um intervalo  $\tau$  característico do RIP, desde que o estado estacionário já tenha sido atingido. O funcionamento de cada um dos ciclos termodinâmicos não foge das noções básicas de máquinas térmicas ensinadas aos alunos do ensino médio:

- Refrigerador: consome trabalho para transferir calor da fonte fria para a fonte quente.  $\dot{W} \geq 0$ ,  $Q_C \geq 0$  e  $Q_H \leq 0$ ;
- Motor: tira calor da fonte quente, transforma parte em trabalho e rejeita calor na fonte fria.  $\dot{W} \leq 0$ ,  $Q_C \leq 0$  e  $Q_H \geq 0$ ;
- Aquecedor: consome trabalho e transfere calor da fonte quente para a fonte fria.  $\dot{W} \geq 0$ ,  $Q_C \leq 0$  e  $Q_H \geq 0$ ;
- Regime não-convencional (N.C.): consome trabalho e rejeita calor em ambas as fontes.  $\dot{W} \geq 0$ ,  $Q_C \leq 0$  e  $Q_H \leq 0$ .

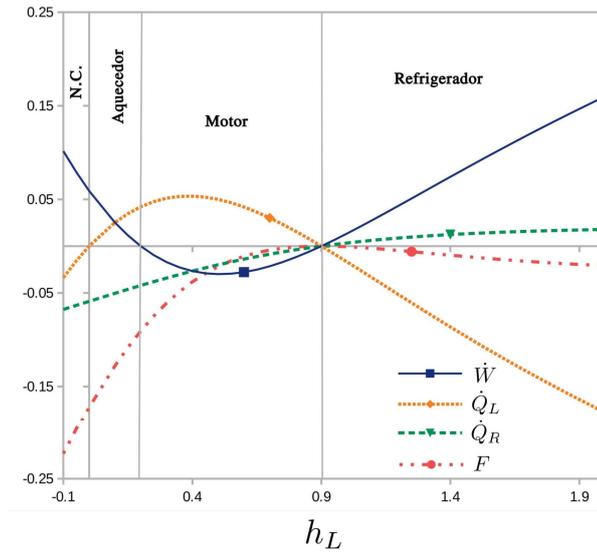


Figura 2 –  $\dot{Q}_L$ ,  $\dot{Q}_R$ ,  $\dot{W}$  e  $F$  em função do campo  $h_L$  do spin do banho à esquerda na cadeia unidimensional do XXZ com hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\alpha = \delta = 1$ ,  $h = \Delta = 0$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = 0.2$ ,  $\beta_L = 2$  e  $\beta_R = 9$

Na figura 2 os parâmetros foram escolhidos de tal forma que ficassem evidentes cada um dos quatro regimes de funcionamento do sistema. Sendo  $\beta_L < \beta_R$  segue que a fonte quente é o banho do lado esquerdo. É possível observar que para que seja transferido calor da fonte fria à fonte quente é necessário que haja realização de trabalho sobre o sistema, o que está de acordo com a segunda lei da termodinâmica. Isso fica evidente na figura 3, onde a partir da equação 5.21 foi calculada a produção de entropia no sistema em função de  $h_L$ . A segunda lei da termodinâmica é satisfeita e, não surpreendentemente, a produção de entropia é nula quando  $f_L = f_R$ , ou seja, quando  $h_R\beta_R = h_L\beta_L$ . Nesse caso específico, todos os fluxos são nulos no estado estacionário.

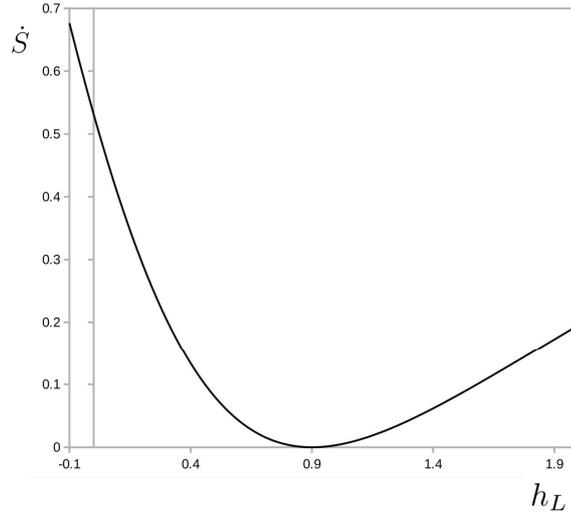


Figura 3 – Produção de entropia  $\dot{S}$  em função do campo  $h_L$  do spin do banho à esquerda na cadeia unidimensional do XXZ com hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\alpha = \delta = 1$ ,  $h = \Delta = 0$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = 0.2$ ,  $\beta_L = 2$  e  $\beta_R = 9$

Por si só, a demonstração de que um sistema tão pequeno e com interações tão simples pode apresentar diversos regimes de funcionamento já é surpreendente. Contudo este não é o único efeito não trivial observado: constatamos a existência de retificação de calor, mudanças nos regimes de funcionamento do sistema sob inversão das temperaturas ou sob a inversão  $f_L \leftrightarrow f_R$  com  $\kappa_L$  ou  $\kappa_R$ , definidos na subseção 6.1.2, diferentes da unidade e existência do fenômeno *one-way street* para  $f_L$  e  $f_R$  arbitrários, diferentemente do resultado já demonstrado em [9], que mostra a existência desse efeito em cadeias de spins muito gerais porém com a restrição de que  $f_L = f = -f_R$ . Para o hamiltoniano 6.26, fazendo a escolha de parâmetros  $\alpha = \delta = 1$ ,  $h = \Delta = 0$  e parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = 0.2$ ,  $\beta_L = 2$  e  $\beta_R = 9$  a corrente de energia é dada por:

$$F = -\frac{160(e^{\beta_L h_L} - e^{\beta_R h_R})^2}{(e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1)(121e^{\beta_L h_L} + 117e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 121e^{\beta_R h_R} + 117)} \quad (6.31)$$

Da expressão acima é simples observar que trocar  $f_L$  por  $f_R$  de maneira arbitrária, ou seja, fazer  $\beta_L \rightarrow \kappa_R \beta_R$ ,  $h_L \rightarrow h_R / \kappa_R$ ,  $\beta_R \rightarrow \kappa_L \beta_L$  e  $h_R \rightarrow h_L / \kappa_L$ , não altera a expressão da corrente de energia. Essa invariância caracteriza o fenômeno de *one-way street*. Evidente que não fizemos uma demonstração da existência desse efeito num contexto tão geral tal como feito em [9]. Simplesmente mostramos que para uma dada escolha de parâmetros específica esse efeito existe. Todavia, acreditamos que o fenômeno exista em um contexto mais geral e, portanto, este tema será objeto de futuras investigações.

Na figura 4 observa-se a mudança de regimes sob a troca de  $f_L$  com  $f_R$ , a existência do *one-way street* e a retificação de calor. A retificação de calor é vista através da comparação de  $\dot{Q}_L$  com  $\dot{Q}_R$  ou de  $\dot{Q}_R$  com  $\dot{Q}_L$ . Agora, por que não comparar as taxas de inserção de calor do mesmo lado sob inversão, por exemplo,  $\dot{Q}_L$  com  $\dot{Q}_L$ ? A razão é

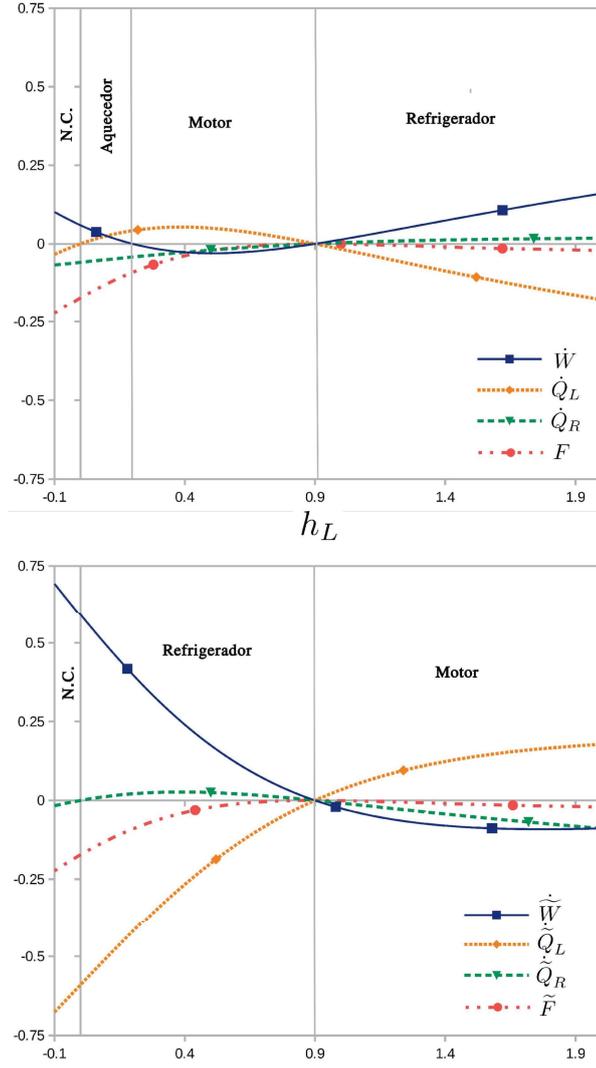


Figura 4 – (acima)  $\dot{Q}_L$ ,  $\dot{Q}_R$ ,  $\dot{W}$  e  $F$  em função do campo  $h_L$  do spin do banho à esquerda na cadeia unidimensional do XXZ com hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\alpha = \delta = 1$ ,  $h = \Delta = 0$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = 0.2$ ,  $\beta_L = 2$  e  $\beta_R = 9$ . (abaixo)  $\dot{Q}_L$ ,  $\dot{Q}_R$ ,  $\dot{W}$  e  $\tilde{F}$  em função do campo  $h_L$  do spin do banho à esquerda na cadeia unidimensional do XXZ com hamiltoniano 6.26, e foram escolhidos  $\kappa_L = 0.1$  e  $\kappa_R = 2$ . No presente contexto, se uma função  $f = f(\beta_L, h_L, \beta_R, h_R)$  então  $\tilde{f} = f(\kappa_R \beta_R, h_R / \kappa_R, \kappa_L \beta_L, h_L / \kappa_L)$

simples: a quantidade de calor que sai da fonte quente(ou fria) quando a conectamos no primeiro spin da cadeia deve ser comparada com a quantidade de calor que sai da fonte quente(ou fria) quando a conectamos no último spin da cadeia para sabermos se o sistema se comporta de maneira diferente sob inversão das fontes. Na nossa notação, quando ocorre a inversão, são "as fontes que se movem" e portanto, se inicialmente  $Q_L$  é o calor inserido da fonte quente, sob a inversão  $f_L \leftrightarrow f_R$  que fazemos,  $\tilde{Q}_R$  passa a ser o calor inserido pela fonte quente. Caso, ao invés de inverter as fontes, estudássemos o efeito de trocar o primeiro spin da cadeia pelo último, o segundo pelo penúltimo, etc, compararíamos o calor que é inserido do lado esquerdo antes e depois dessa troca para quantificar a retificação de

calor.

Para o hamiltoniano 6.26 com mesmos parâmetros usados para plotar a figura 4 entretanto fazendo a inversão  $f_L \leftrightarrow f_R$  com  $\kappa_L = \kappa_R = 1$ , resulta que  $\dot{Q}_L = \dot{Q}_R$  e  $\dot{Q}_R = \dot{Q}_L$ , ou seja, não há retificação nesse caso. Mais uma vez, isso demonstra que ao estudar a equação de Lindblad devemos estar atentos ao processo sob o qual o sistema foi submetido, para então, como resultado, obedecer uma equação de Lindblad. Na situação deste parágrafo e a do parágrafo anterior o sistema obedece exatamente a mesma equação de Lindblad mas, sob a perspectiva da termodinâmica, apresenta diferenças significativas.

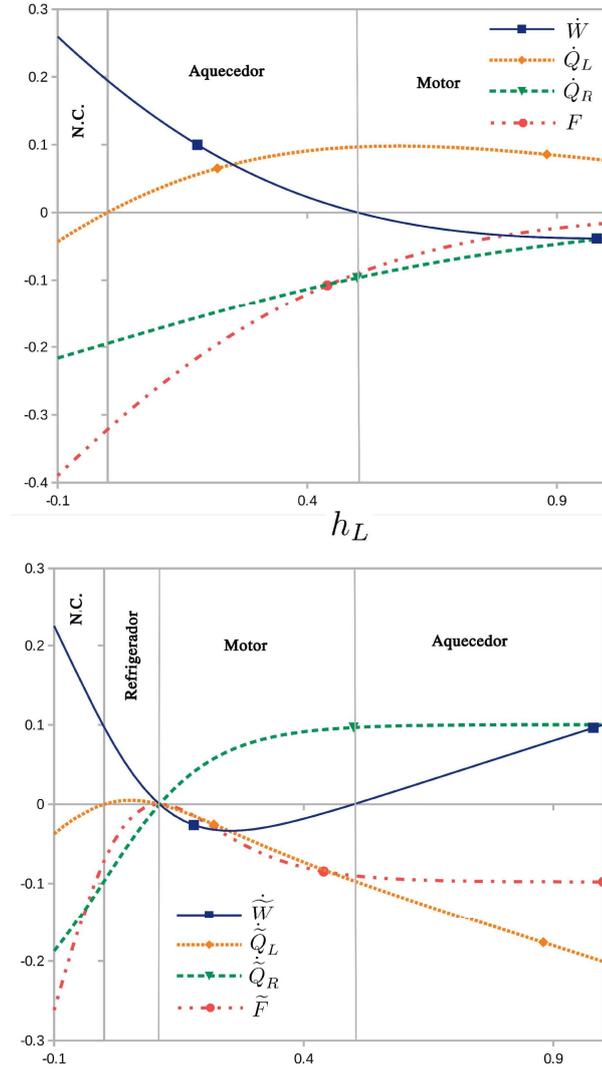


Figura 5 – (acima)  $\dot{Q}_L$ ,  $\dot{Q}_R$ ,  $\dot{W}$  e  $F$  em função do campo  $h_L$  do spin do banho à esquerda na cadeia unidimensional do XXZ com hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\alpha = \delta = 1$ ,  $h = \Delta = 0$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = 0.8$ ,  $\beta_L = 2$  e  $\beta_R = 9$ . (abaixo)  $\dot{Q}_L$ ,  $\dot{Q}_R$ ,  $\dot{W}$  e  $\tilde{F}$  em função do campo  $h_L$  do spin do banho à esquerda na cadeia unidimensional do XXZ com hamiltoniano 6.26. No presente contexto, se uma função  $f = f(\beta_L, h_L, \beta_R, h_R)$  então  $\tilde{f} = f(\beta_R, h_R, \beta_L, h_L)$

Na figura 5 mostramos a diferença no comportamento do sistema sob inversão

somente das temperaturas, isto é, fazemos  $\beta_L \leftrightarrow \beta_R$  e não modificamos  $h_L$  e  $h_R$ . Sob a ótica da equação de Lindblad, esse procedimento parece um pouco estranho pois trocando somente as temperaturas, em geral, implica na mudança de  $f_L$  e  $f_R$  de forma distinta à simples inversão  $f_L \leftrightarrow f_R$ . Contudo, fisicamente é interessante saber como se comporta o sistema sob inversão somente das temperaturas já que esse tipo de troca é perfeitamente imaginável em um experimento em laboratório. Nessa figura é nítida a mudança de regimes sob inversão das temperaturas. A mudança na corrente de energia e nas taxas de inserção de calor e realização de trabalho podem ser vistas na figura 6

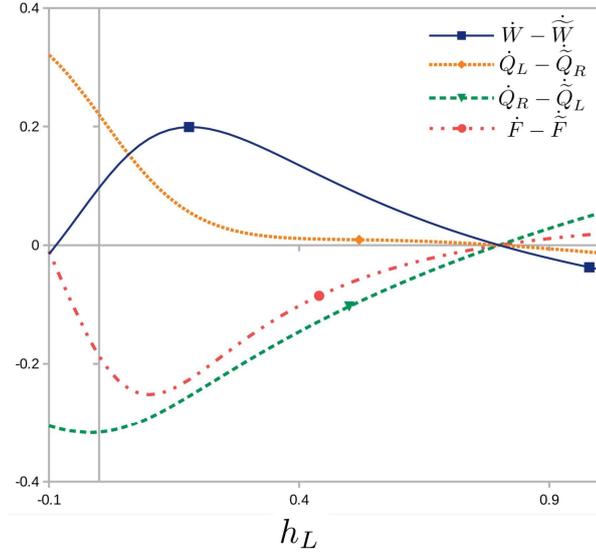


Figura 6 –  $\dot{Q}_L - \dot{Q}_R$ ,  $\dot{Q}_R - \dot{Q}_L$ ,  $\dot{W} - \dot{\tilde{W}}$  e  $F - \tilde{F}$  em função do campo  $h_L$  do spin do banho à esquerda na cadeia unidimensional do XXZ com hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\alpha = \delta = 1$ ,  $h = \Delta = 0$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = 0.8$ ,  $\beta_L = 2$  e  $\beta_R = 9$ . No presente contexto, se uma função  $f = f(\beta_L, h_L, \beta_R, h_R)$  então  $\tilde{f} = f(\beta_R, h_R, \beta_L, h_L)$

Consideremos agora a situação, corriqueiramente estudada, em que  $f_L = f = -f_R$ . Nesse caso, segue das definições de  $f_L$  e  $f_R$  que  $\beta_L h_L = -\beta_R h_R$ , ou seja, somente três desses parâmetros são livres. Além disso, para se manter a positividade das temperaturas inversas  $\beta_L$  e  $\beta_R$ , necessariamente, os campos  $h_L$  e  $h_R$  tem que ter sinais distintos. Isso têm de ser considerado ao avaliarmos, por exemplo, a taxa com que é realizado trabalho sobre o sistema em função do campo  $h_L$ . Seja 6.26 o hamiltoniano do sistema sujeito ao RIP com interações e hamiltoniano dos banhos dados pelas equações 6.2, 6.3 e 6.4. Sob essas condições, calculamos o estado estacionário do sistema e, por conseguinte, as taxas de inserção de calor e realização de trabalho em ambas as extremidades da cadeia de spins:

$$\begin{aligned}
\dot{Q}_L = & \left[ 2\gamma f \alpha^2 h_L ((\gamma^2 + \delta^2)^2 (81\gamma^4 - 18\gamma^2(2f^2 - 3)(\delta^2 + \Delta^2) + (3 - 2f^2)^2(\delta^2 - \Delta^2)^2) + \alpha^6(72\gamma^2 \right. \\
& + 3\Delta^2 + 4\delta^2(5f^2 + 9)) + \alpha^2(\gamma^2 + \delta^2)(216\gamma^4 - 3\gamma^2(4\delta^2(f^2 - 9) + \Delta^2(16f^2 - 27)) - (2f^2 \\
& - 3)(\Delta^4 + 4\delta^4(f^2 + 1) + \delta^2\Delta^2(13 - 4f^2))) + 2\alpha^4(99\gamma^4 + \gamma^2(2\delta^2(7f^2 + 48) + 3\Delta^2(5 - 2f^2)) \\
& - 3\delta^2\Delta^2(f^2 - 4) + \delta^4(2f^4 - 6f^2 + 15)) + 9\alpha^8] \left[ \alpha^8(81\gamma^2 + 3\Delta^2 + \delta^2(20f^2 + 39)) + (\gamma^2 \right. \\
& + \delta^2)^2(81\gamma^6 + \gamma^2(\delta^4(27 - 8f^4) + 2\delta^2\Delta^2(8f^4 + 9) + \Delta^4(27 - 8f^4)) + 9\gamma^4(2f^2 + 9)(\delta^2 + \Delta^2) \\
& - (2f^2 - 3)(\delta^2 - \Delta^2)^2(\delta^2 + \Delta^2)) + 2\alpha^6(135\gamma^4 + 3\gamma^2(7\delta^2(f^2 + 6) + \Delta^2(7 - 2f^2)) \\
& + \delta^2\Delta^2(17 - 3f^2) + \delta^4(2f^4 - 3f^2 + 21)) + 2\alpha^4(207\gamma^6 + \gamma^4(\delta^2(291 - 7f^2) + 3\Delta^2(26 - 7f^2)) \\
& + \gamma^2(-\Delta^4(f^2 - 3) + \delta^4(-8f^4 - 16f^2 + 107) + \delta^2\Delta^2(4f^4 - 37f^2 + 104)) - \delta^2(\Delta^4(f^2 - 3) \\
& + \delta^4(4f^4 + f^2 - 11) - 2\delta^2\Delta^2(2f^4 - 9f^2 + 14))) + \alpha^2(\gamma^2 + \delta^2)(297\gamma^6 - 3\gamma^4(\delta^2(22f^2 - 105) \\
& + 2\Delta^2(2f^2 - 33)) + \gamma^2(\delta^4(20f^4 - 44f^2 + 111) - 4\delta^2\Delta^2(6f^4 + 2f^2 - 33) + \Delta^4(4f^4 - 20f^2 \\
& + 33)) + \delta^6(4f^4 - 10f^2 + 13) - 2\delta^4\Delta^2(4f^4 - 14f^2 + 1) + \delta^2\Delta^4(4f^4 - 18f^2 + 25)) + 9\alpha^{10}]^{-1} \\
& \tag{6.32}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{Q}_R = & - \left[ 2\gamma f \alpha^2 h_R ((\gamma^2 + \delta^2)^2 (81\gamma^4 - 18\gamma^2(2f^2 - 3)(\delta^2 + \Delta^2) + (3 - 2f^2)^2(\delta^2 - \Delta^2)^2) + \alpha^6(72\gamma^2 \right. \\
& + 3\Delta^2 + 4\delta^2(5f^2 + 9)) + \alpha^2(\gamma^2 + \delta^2)(216\gamma^4 - 3\gamma^2(4\delta^2(f^2 - 9) + \Delta^2(16f^2 - 27)) - (2f^2 \\
& - 3)(\Delta^4 + 4\delta^4(f^2 + 1) + \delta^2\Delta^2(13 - 4f^2))) + 2\alpha^4(99\gamma^4 + \gamma^2(2\delta^2(7f^2 + 48) + 3\Delta^2(5 - 2f^2)) \\
& - 3\delta^2\Delta^2(f^2 - 4) + \delta^4(2f^4 - 6f^2 + 15)) + 9\alpha^8] \left[ \alpha^8(81\gamma^2 + 3\Delta^2 + \delta^2(20f^2 + 39)) + (\gamma^2 \right. \\
& + \delta^2)^2(81\gamma^6 + \gamma^2(\delta^4(27 - 8f^4) + 2\delta^2\Delta^2(8f^4 + 9) + \Delta^4(27 - 8f^4)) + 9\gamma^4(2f^2 + 9)(\delta^2 + \Delta^2) \\
& - (2f^2 - 3)(\delta^2 - \Delta^2)^2(\delta^2 + \Delta^2)) + 2\alpha^6(135\gamma^4 + 3\gamma^2(7\delta^2(f^2 + 6) + \Delta^2(7 - 2f^2)) + \delta^2\Delta^2(17 \\
& - 3f^2) + \delta^4(2f^4 - 3f^2 + 21)) + 2\alpha^4(207\gamma^6 + \gamma^4(\delta^2(291 - 7f^2) + 3\Delta^2(26 - 7f^2)) \\
& + \gamma^2(-\Delta^4(f^2 - 3) + \delta^4(-8f^4 - 16f^2 + 107) + \delta^2\Delta^2(4f^4 - 37f^2 + 104)) - \delta^2(\Delta^4(f^2 - 3) \\
& + \delta^4(4f^4 + f^2 - 11) - 2\delta^2\Delta^2(2f^4 - 9f^2 + 14))) + \alpha^2(\gamma^2 + \delta^2)(297\gamma^6 - 3\gamma^4(\delta^2(22f^2 - 105) \\
& + 2\Delta^2(2f^2 - 33)) + \gamma^2(\delta^4(20f^4 - 44f^2 + 111) - 4\delta^2\Delta^2(6f^4 + 2f^2 - 33) + \Delta^4(4f^4 - 20f^2 \\
& + 33)) + \delta^6(4f^4 - 10f^2 + 13) - 2\delta^4\Delta^2(4f^4 - 14f^2 + 1) + \delta^2\Delta^4(4f^4 - 18f^2 + 25)) + 9\alpha^{10}]^{-1} \\
& \tag{6.33}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{W}_L = & - \left[ 2f\alpha^2\gamma(9h_L\alpha^8 + (h_L(72\gamma^2 + 4(5f^2 + 9)\delta^2 + 3\Delta^2) - 12f\delta\Delta^2)\alpha^6 + 2(2f\delta(9\gamma^4 + 2(5\delta^2 \right. \\
& - 6f^2\Delta^2)\gamma^2 + \delta^4 - \Delta^4 - 2(f^2 - 3)\delta^2\Delta^2) + h_L(99\gamma^4 + (2(7f^2 + 48)\delta^2 + 3(5 - 2f^2)\Delta^2)\gamma^2 \\
& + (2f^4 - 6f^2 + 15)\delta^4 - 3(f^2 - 4)\delta^2\Delta^2))\alpha^4 + (\gamma^2 + \delta^2)(4f\delta(54\gamma^4 + 3(2(3f^2 + 7)\delta^2 + (5 \\
& - 6f^2)\Delta^2)\gamma^2 + 2(f^2 + 2)\delta^4 + (1 - 2f^2)\Delta^4 + 13\delta^2\Delta^2) + h_L(216\gamma^4 - 3(4(f^2 - 9)\delta^2 + (16f^2 \\
& - 27)\Delta^2)\gamma^2 - (2f^2 - 3)(4(f^2 + 1)\delta^4 + (13 - 4f^2)\Delta^2\delta^2 + \Delta^4)))\alpha^2 + (\gamma^2 + \delta^2)^2(h_L(81\gamma^4 \\
& - 18(2f^2 - 3)(\delta^2 + \Delta^2)\gamma^2 + (3 - 2f^2)^2(\delta^2 - \Delta^2)^2) - 4f\delta(-81\gamma^4 + 18((f^2 - 2)\delta^2 - f^2\Delta^2)\gamma^2 \\
& + (2f^2 - 3)(\delta^2 - \Delta^2)^2)) - h(9\alpha^8 + (72\gamma^2 + 4(5f^2 + 9)\delta^2 + 3\Delta^2)\alpha^6 + 2(99\gamma^4 + (2(7f^2 \\
& + 48)\delta^2 + 3(5 - 2f^2)\Delta^2)\gamma^2 + (2f^4 - 6f^2 + 15)\delta^4 - 3(f^2 - 4)\delta^2\Delta^2)\alpha^4 + (\gamma^2 + \delta^2)(216\gamma^4 \\
& - 3(4(f^2 - 9)\delta^2 + (16f^2 - 27)\Delta^2)\gamma^2 - (2f^2 - 3)(4(f^2 + 1)\delta^4 + (13 - 4f^2)\Delta^2\delta^2 + \Delta^4))\alpha^2 \\
& + (\gamma^2 + \delta^2)^2(81\gamma^4 - 18(2f^2 - 3)(\delta^2 + \Delta^2)\gamma^2 + (3 - 2f^2)^2(\delta^2 - \Delta^2)^2)) \left. \right] \left[ 9\alpha^{10} + (81\gamma^2 \right. \\
& + (20f^2 + 39)\delta^2 + 3\Delta^2)\alpha^8 + 2(135\gamma^4 + 3(7(f^2 + 6)\delta^2 + (7 - 2f^2)\Delta^2)\gamma^2 + (2f^4 - 3f^2 \\
& + 21)\delta^4 + (17 - 3f^2)\delta^2\Delta^2)\alpha^6 + 2(207\gamma^6 + ((291 - 7f^2)\delta^2 + 3(26 - 7f^2)\Delta^2)\gamma^4 + ((-8f^4 \\
& - 16f^2 + 107)\delta^4 + (4f^4 - 37f^2 + 104)\Delta^2\delta^2 - (f^2 - 3)\Delta^4)\gamma^2 - \delta^2((4f^4 + f^2 - 11)\delta^4 \\
& - 2(2f^4 - 9f^2 + 14)\Delta^2\delta^2 + (f^2 - 3)\Delta^4))\alpha^4 + (\gamma^2 + \delta^2)(297\gamma^6 - 3((22f^2 - 105)\delta^2 \\
& + 2(2f^2 - 33)\Delta^2)\gamma^4 + ((20f^4 - 44f^2 + 111)\delta^4 - 4(6f^4 + 2f^2 - 33)\Delta^2\delta^2 + (4f^4 - 20f^2 \\
& + 33)\Delta^4)\gamma^2 + (4f^4 - 10f^2 + 13)\delta^6 + (4f^4 - 18f^2 + 25)\delta^2\Delta^4 - 2(4f^4 - 14f^2 + 1)\delta^4\Delta^2)\alpha^2 \\
& + (\gamma^2 + \delta^2)^2(81\gamma^6 + 9(2f^2 + 9)(\delta^2 + \Delta^2)\gamma^4 + ((27 - 8f^4)\delta^4 + 2(8f^4 + 9)\Delta^2\delta^2 + (27 \\
& - 8f^4)\Delta^4)\gamma^2 - (2f^2 - 3)(\delta^2 - \Delta^2)^2(\delta^2 + \Delta^2) \left. \right]^{-1} \tag{6.34}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{W}_R = & \left[ 2f\alpha^2\gamma(9h_R\alpha^8 + (h_R(72\gamma^2 + 4(5f^2 + 9)\delta^2 + 3\Delta^2) - 12f\delta\Delta^2)\alpha^6 + 2(2f\delta(9\gamma^4 + 2(5\delta^2 \right. \\
& - 6f^2\Delta^2)\gamma^2 + \delta^4 - \Delta^4 - 2(f^2 - 3)\delta^2\Delta^2) + h_R(99\gamma^4 + (2(7f^2 + 48)\delta^2 + 3(5 - 2f^2)\Delta^2)\gamma^2 \\
& + (2f^4 - 6f^2 + 15)\delta^4 - 3(f^2 - 4)\delta^2\Delta^2))\alpha^4 + (\gamma^2 + \delta^2)(4f\delta(54\gamma^4 + 3(2(3f^2 + 7)\delta^2 \\
& + (5 - 6f^2)\Delta^2)\gamma^2 + 2(f^2 + 2)\delta^4 + (1 - 2f^2)\Delta^4 + 13\delta^2\Delta^2) + h_R(216\gamma^4 - 3(4(f^2 - 9)\delta^2 \\
& + (16f^2 - 27)\Delta^2)\gamma^2 - (2f^2 - 3)(4(f^2 + 1)\delta^4 + (13 - 4f^2)\Delta^2\delta^2 + \Delta^4))\alpha^2 + (\gamma^2 \\
& + \delta^2)^2(h_R(81\gamma^4 - 18(2f^2 - 3)(\delta^2 + \Delta^2)\gamma^2 + (3 - 2f^2)^2(\delta^2 - \Delta^2)^2) - 4f\delta(-81\gamma^4 \\
& + 18((f^2 - 2)\delta^2 - f^2\Delta^2)\gamma^2 + (2f^2 - 3)(\delta^2 - \Delta^2)^2)) - h(9\alpha^8 + (72\gamma^2 + 4(5f^2 + 9)\delta^2 \\
& + 3\Delta^2)\alpha^6 + 2(99\gamma^4 + (2(7f^2 + 48)\delta^2 + 3(5 - 2f^2)\Delta^2)\gamma^2 + (2f^4 - 6f^2 + 15)\delta^4 - 3(f^2 \\
& - 4)\delta^2\Delta^2)\alpha^4 + (\gamma^2 + \delta^2)(216\gamma^4 - 3(4(f^2 - 9)\delta^2 + (16f^2 - 27)\Delta^2)\gamma^2 - (2f^2 - 3)(4(f^2 \\
& + 1)\delta^4 + (13 - 4f^2)\Delta^2\delta^2 + \Delta^4))\alpha^2 + (\gamma^2 + \delta^2)^2(81\gamma^4 - 18(2f^2 - 3)(\delta^2 + \Delta^2)\gamma^2 + (3 \\
& - 2f^2)^2(\delta^2 - \Delta^2)^2)) \left. \right] \left[ 9\alpha^{10} + (81\gamma^2 + (20f^2 + 39)\delta^2 + 3\Delta^2)\alpha^8 + 2(135\gamma^4 + 3(7(f^2 + 6)\delta^2 \right. \\
& + (7 - 2f^2)\Delta^2)\gamma^2 + (2f^4 - 3f^2 + 21)\delta^4 + (17 - 3f^2)\delta^2\Delta^2)\alpha^6 + 2(207\gamma^6 + ((291 - 7f^2)\delta^2 \\
& + 3(26 - 7f^2)\Delta^2)\gamma^4 + ((-8f^4 - 16f^2 + 107)\delta^4 + (4f^4 - 37f^2 + 104)\Delta^2\delta^2 - (f^2 - 3)\Delta^4)\gamma^2 \\
& - \delta^2((4f^4 + f^2 - 11)\delta^4 - 2(2f^4 - 9f^2 + 14)\Delta^2\delta^2 + (f^2 - 3)\Delta^4))\alpha^4 + (\gamma^2 + \delta^2)(297\gamma^6 \\
& - 3((22f^2 - 105)\delta^2 + 2(2f^2 - 33)\Delta^2)\gamma^4 + ((20f^4 - 44f^2 + 111)\delta^4 - 4(6f^4 + 2f^2 - 33)\Delta^2\delta^2 \\
& + (4f^4 - 20f^2 + 33)\Delta^4)\gamma^2 + (4f^4 - 10f^2 + 13)\delta^6 + (4f^4 - 18f^2 + 25)\delta^2\Delta^4 - 2(4f^4 - 14f^2 \\
& + 1)\delta^4\Delta^2)\alpha^2 + (\gamma^2 + \delta^2)^2(81\gamma^6 + 9(2f^2 + 9)(\delta^2 + \Delta^2)\gamma^4 + ((27 - 8f^4)\delta^4 + 2(8f^4 + 9)\Delta^2\delta^2 \\
& + (27 - 8f^4)\Delta^4)\gamma^2 - (2f^2 - 3)(\delta^2 - \Delta^2)^2(\delta^2 + \Delta^2)) \left. \right]^{-1} \tag{6.35}
\end{aligned}$$

Nas figuras 7 e 8, para uma configuração específica do XXZ, plotamos a corrente de energia e as taxas com que é inserido calor e realizado trabalho no sistema em função do parâmetro simétrico de acoplamento  $\Delta$ . Comparamos, similarmente às seções anteriores, com o caso em que se faz  $f \rightarrow -f$ , lembrando que existem infinitas maneiras de se fazer essa mudança: basta fazermos  $h_L \rightarrow -h_L$ ,  $\beta_R \rightarrow \kappa_R\beta_R$  e  $h_R \rightarrow -h_R/\kappa_R$ , onde  $\kappa_R \in (0, \infty)$ . É interessante notar a existência de retificação sob a inversão feita. Por exemplo, a taxa de inserção de calor pela fonte fria,  $\dot{Q}_R$  no gráfico à esquerda da figura 7 e  $\dot{\tilde{Q}}_R$  no gráfico à direita, sofre uma variação abrupta frente à mudança feita: para o sistema pós inversão a taxa com que é inserido calor pela fonte fria se aproxima consideravelmente de zero. Além disso, mais uma vez fica claro que não há nenhuma inconsistência termodinâmica no fenômeno de *one-way street*, também presente nos resultados em questão, pois embora a corrente total de energia não varie sob a inversão  $f \rightarrow -f$  tal que de fato haja fluxo de energia da fonte fria para a fonte quente em algumas situações, é necessário realizar trabalho sobre o sistema para que isso aconteça, de forma que a produção de entropia seja não-negativa.

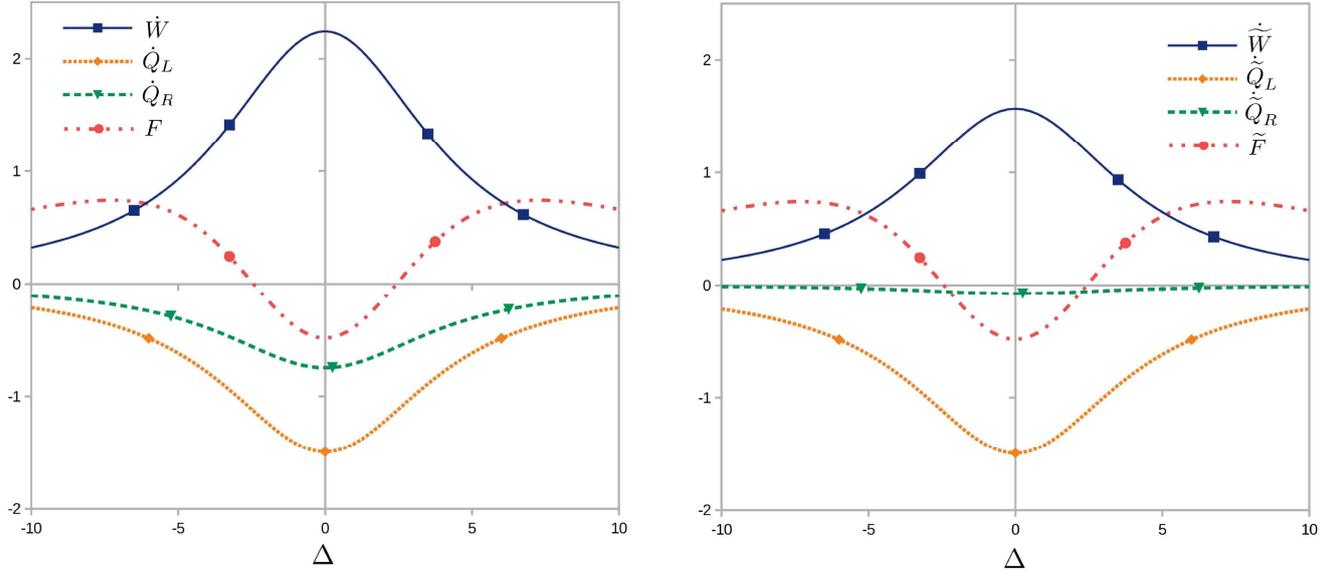


Figura 7 – (esquerda)  $\dot{Q}_L$ ,  $\dot{Q}_R$ ,  $\dot{W}$  e  $F$  do acoplamento  $\Delta$  do hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\delta = 1$ ,  $h = 0$  e  $\alpha = 2$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = -0.5$ ,  $\beta_R = 10$ ,  $h_L = 1$  e  $\beta_L = -h_R\beta_R/h_L = 5$ . (direita)  $\dot{Q}_L$ ,  $\dot{Q}_R$ ,  $\dot{W}$  e  $\tilde{F}$  em função do acoplamento  $\Delta$  do spin do hamiltoniano 6.26 e foi escolhido  $\kappa_R = 10$ . No presente contexto, se uma função  $f = f(h_L, \beta_R, h_R)$  então  $\tilde{f} = f(-h_L, \kappa_R\beta_R, -h_R/\kappa_R)$

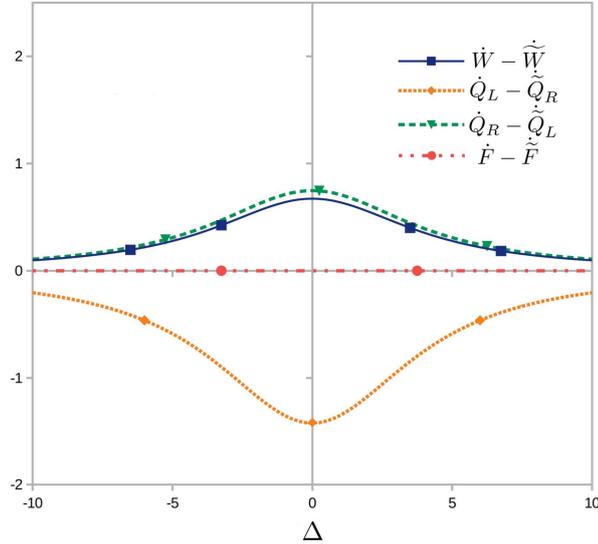


Figura 8 –  $\dot{Q}_L - \dot{Q}_R$ ,  $\dot{Q}_R - \dot{Q}_L$ ,  $\dot{W} - \dot{W}$  e  $F - \tilde{F}$  do acoplamento  $\Delta$  do hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\delta = 1$ ,  $h = 0$  e  $\alpha = 2$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = -0.5$ ,  $\beta_R = 10$ ,  $h_L = 1$  e  $\beta_L = -h_R\beta_R/h_L = 5$ .  $\kappa_R = 10$ . No presente contexto, se uma função  $f = f(h_L, \beta_R, h_R)$  então  $\tilde{f} = f(-h_L, \kappa_R\beta_R, -h_R/\kappa_R)$

Reiteramos que existem diversos contextos possíveis para que um sistema, pelo

menos sob o RIP, obedeça uma mesma equação de Lindblad e, com o objetivo de fixar e dar a devida importância ao assunto, exibimos as figuras 9 – 12, que mostram o comportamento do mesmo sistema estudado nas figuras 7 e 8. Nesse novo cenário, escolhemos  $\kappa_R = 100$  nas figuras 9 e 10 e  $\kappa_R = 0.1$  nas figuras 11 e 12. Novamente, é possível observar o fenômeno de *one-way street* e a existência de retificação, sendo o tipo de retificação distinto dependendo da escolha de  $\kappa_R$ . Tal como na figura 7, a taxa com que calor é inserido pela fonte fria no sistema da figura 9 vai à valores próximos de zero quando é feita a inversão  $f \rightarrow -f$  em questão. Essa atenuação é ainda mais acentuada em comparação com a ocorrida na inversão  $f \rightarrow -f$  exibida na figura 7. No cenário da figura 11 o oposto ocorre. Sob a inversão  $f \rightarrow -f$  considerada, o módulo da taxa de inserção de calor da fonte fria,  $\dot{Q}_R$  no gráfico à esquerda na figura 11 e  $\dot{\tilde{Q}}_L$  no gráfico à direita, varia pouco se comparado à variação do módulo da taxa de inserção de calor da fonte quente.

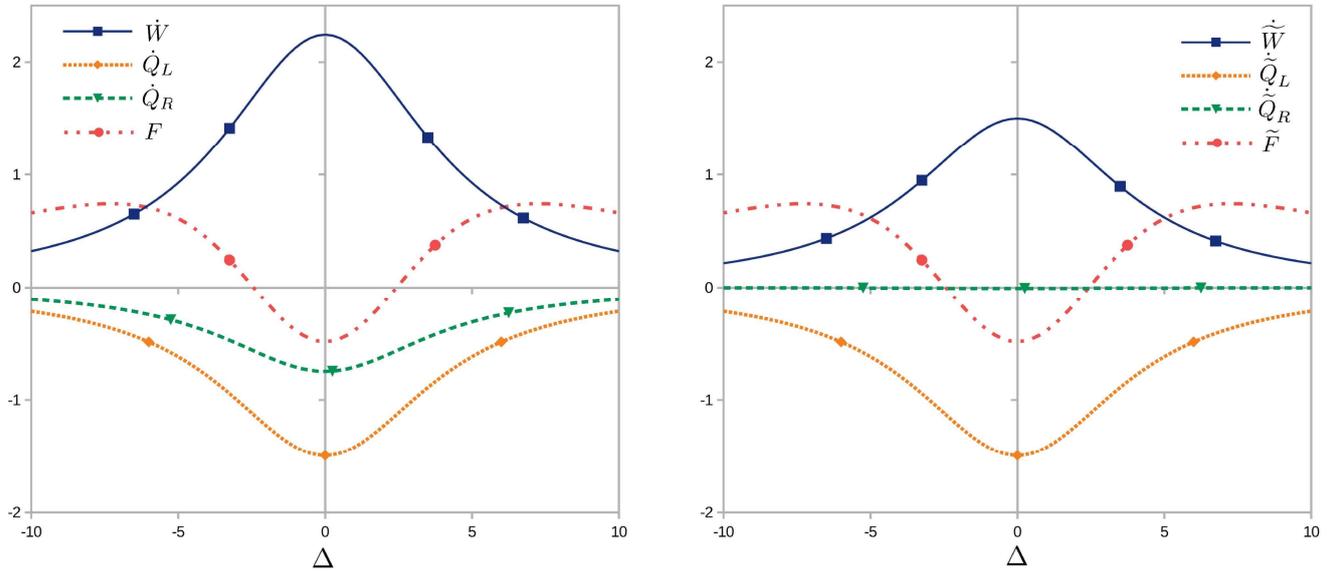


Figura 9 – (esquerda)  $\dot{Q}_L$ ,  $\dot{Q}_R$ ,  $\dot{W}$  e  $F$  do acoplamento  $\Delta$  do hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\delta = 1$ ,  $h = 0$  e  $\alpha = 2$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = -0.5$ ,  $\beta_R = 10$ ,  $h_L = 1$  e  $\beta_L = -h_R\beta_R/h_L = 5$ . (direita)  $\dot{\tilde{Q}}_L$ ,  $\dot{\tilde{Q}}_R$ ,  $\dot{\tilde{W}}$  e  $\tilde{F}$  em função do acoplamento  $\Delta$  do spin do hamiltoniano 6.26 e foi escolhido  $\kappa_R = 100$ . No presente contexto, se uma função  $f = f(h_L, \beta_R, h_R)$  então  $\tilde{f} = f(-h_L, \kappa_R\beta_R, -h_R/\kappa_R)$

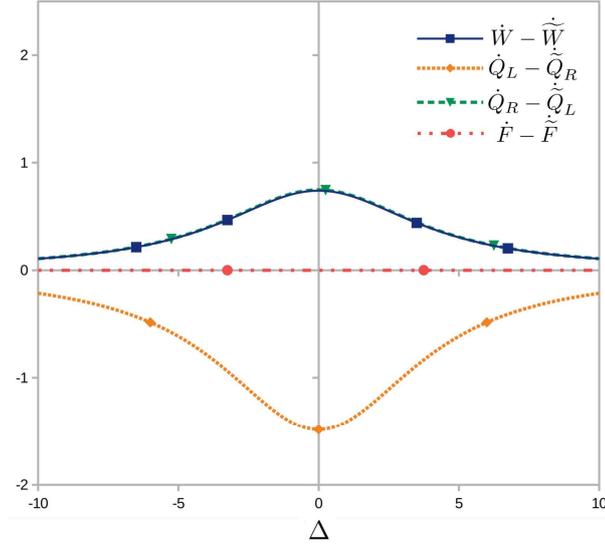


Figura 10 –  $\dot{Q}_L - \dot{\tilde{Q}}_R$ ,  $\dot{Q}_R - \dot{\tilde{Q}}_L$ ,  $\dot{W} - \dot{\tilde{W}}$  e  $F - \tilde{F}$  do acoplamento  $\Delta$  do hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\delta = 1$ ,  $h = 0$  e  $\alpha = 2$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = -0.5$ ,  $\beta_R = 10$ ,  $h_L = 1$  e  $\beta_L = -h_R\beta_R/h_L = 5$ .  $\kappa_R = 100$ . No presente contexto, se uma função  $f = f(h_L, \beta_R, h_R)$  então  $\tilde{f} = f(-h_L, \kappa_R\beta_R, -h_R/\kappa_R)$

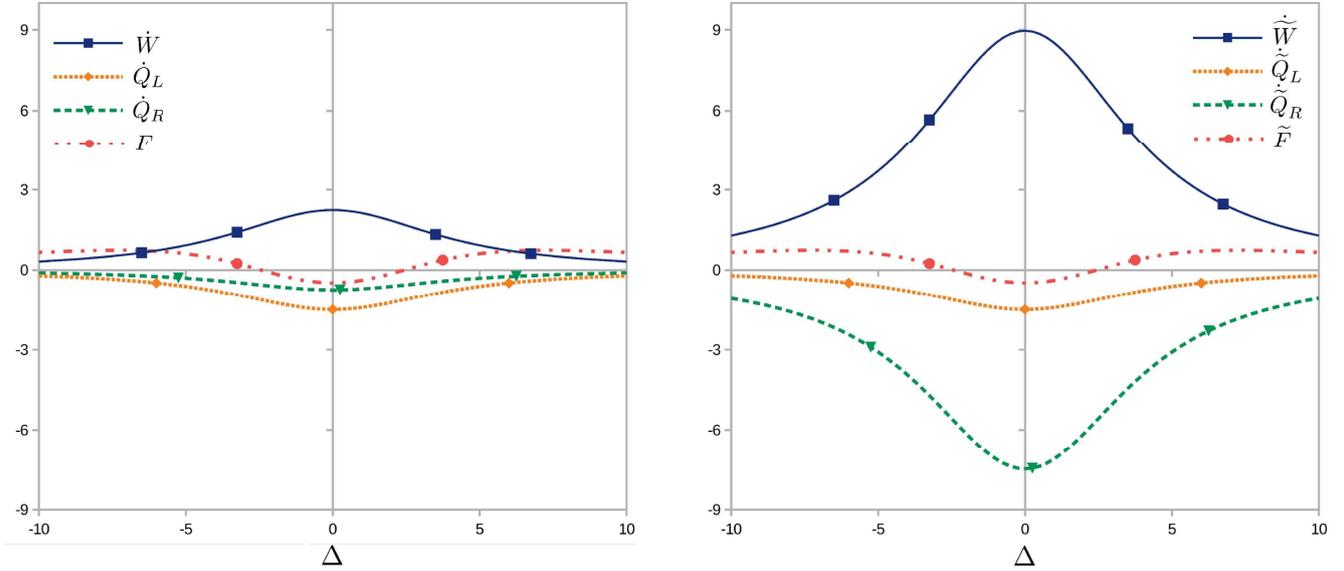


Figura 11 – (esquerda)  $\dot{Q}_L$ ,  $\dot{Q}_R$ ,  $\dot{W}$  e  $F$  do acoplamento  $\Delta$  do hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\delta = 1$ ,  $h = 0$  e  $\alpha = 2$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = -0.5$ ,  $\beta_R = 10$ ,  $h_L = 1$  e  $\beta_L = -h_R\beta_R/h_L = 5$ . (direita)  $\dot{\tilde{Q}}_L$ ,  $\dot{\tilde{Q}}_R$ ,  $\dot{\tilde{W}}$  e  $\tilde{F}$  em função do acoplamento  $\Delta$  do spin do hamiltoniano 6.26 e foi escolhido  $\kappa_R = 0.1$ . No presente contexto, se uma função  $f = f(h_L, \beta_R, h_R)$  então  $\tilde{f} = f(-h_L, \kappa_R\beta_R, -h_R/\kappa_R)$

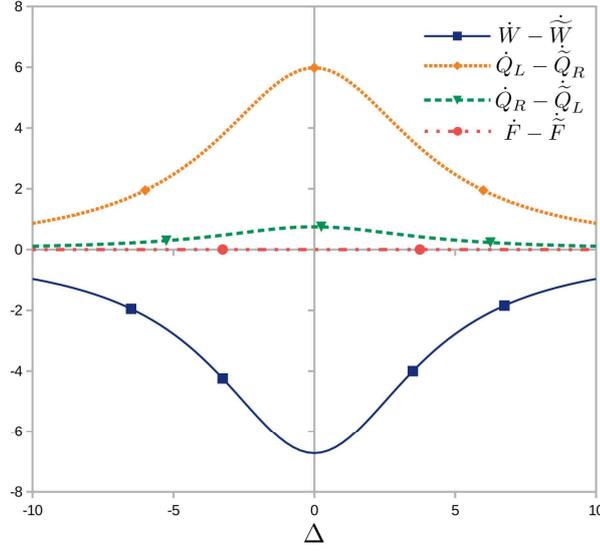


Figura 12 –  $\dot{Q}_L - \dot{\tilde{Q}}_R$ ,  $\dot{Q}_R - \dot{\tilde{Q}}_L$ ,  $\dot{W} - \dot{\tilde{W}}$  e  $F - \tilde{F}$  do acoplamento  $\Delta$  do hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\delta = 1$ ,  $h = 0$  e  $\alpha = 2$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = -0.5$ ,  $\beta_R = 10$ ,  $h_L = 1$  e  $\beta_L = -h_R\beta_R/h_L = 5$ .  $\kappa_R = 0.1$ . No presente contexto, se uma função  $f = f(h_L, \beta_R, h_R)$  então  $\tilde{f} = f(-h_L, \kappa_R\beta_R, -h_R/\kappa_R)$

Sob o RIP considerado, quando o campo interno  $h$  da cadeia de spins é diferente de zero, mesmo se restringirmos que  $f_L = f = -f$ , a corrente de energia sob a inversão  $f_L \leftrightarrow f_R$  pode variar. O caso limite onde a retificação é nula é caracterizado pela simples troca de sinal da corrente sob a inversão considerada, isto é, a corrente se inverte juntamente com os banhos. Consideraremos agora a situação em que  $h \neq 0$  para visualizar o efeito de variação da energia sob inversão  $f_L \leftrightarrow f_R$ : seja 6.26 o hamiltoniano do sistema sujeito ao RIP com interações e hamiltoniano dos banhos dados pelas equações 6.2, 6.3 e 6.4. Com o intuito de reduzir o custo computacional e, novamente, observar a variação da energia sob inversão dos banhos, fazemos as escolhas de parâmetros, à princípio arbitrárias,  $\alpha = \delta = h = \Delta = 1$  e os parâmetros dos banhos  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ , calculamos o estado estacionário do sistema e, por conseguinte, as taxas de inserção de calor e realização de trabalho em ambos os lados da cadeia de spins:

$$\begin{aligned}
 \dot{Q}_L = & - \left[ 2h_L(852e^{\beta_L h_L} + 1767e^{2\beta_L h_L} + 905e^{3\beta_L h_L} + 994e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 4669e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} \right. \\
 & + 2761e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} - 4669e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} - 994e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 852e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} \\
 & \left. - 1767e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} - 852e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} - 852e^{\beta_R h_R} - 2761e^{2\beta_R h_R} - 905e^{3\beta_R h_R} \right] \left[ 9131e^{\beta_L h_L} \right. \\
 & + 8810e^{2\beta_L h_L} + 2807e^{3\beta_L h_L} + 26894e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 26569e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 8692e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} \\
 & + 26569e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 26894e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 9013e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 8810e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} \\
 & \left. + 9131e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 3124e^{3\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 9013e^{\beta_R h_R} + 8692e^{2\beta_R h_R} + 2807e^{3\beta_R h_R} + 3124 \right]^{-1}
 \end{aligned}
 \tag{6.36}$$

$$\begin{aligned}
\dot{Q}_R = & \left[ 2h_R(852e^{\beta_L h_L} + 1767e^{2\beta_L h_L} + 905e^{3\beta_L h_L} + 994e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 4669e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} \right. \\
& + 2761e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} - 4669e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} - 994e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 852e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} \\
& - 1767e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} - 852e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} - 852e^{\beta_R h_R} - 2761e^{2\beta_R h_R} - 905e^{3\beta_R h_R} \left. \right] \left[ 9131e^{\beta_L h_L} \right. \\
& + 8810e^{2\beta_L h_L} + 2807e^{3\beta_L h_L} + 26894e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 26569e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 8692e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} \\
& + 26569e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 26894e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 9013e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 8810e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} \\
& \left. + 9131e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 3124e^{3\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 9013e^{\beta_R h_R} + 8692e^{2\beta_R h_R} + 2807e^{3\beta_R h_R} + 3124 \right]^{-1}
\end{aligned} \tag{6.37}$$

$$\begin{aligned}
\dot{W}_L = & \left[ 2(e^{\beta_L h_L} - e^{\beta_R h_R})((905h_L - 2373)e^{3\beta_L h_L} + (2619h_L - 9901)e^{\beta_L h_L} + (2672h_L - 8570)e^{2\beta_L h_L} \right. \\
& + 284(3h_L + 7)e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + (2619h_L + 4663)e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + (2672h_L + 3226)e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} \\
& + (2761h_L - 1379)e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} + (8335h_L - 9729)e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + (8335h_L - 6941)e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} \\
& + (905h_L + 563)e^{2\beta_R h_R} + (2761h_L - 4143)e^{\beta_R h_R} + 284(3h_L - 13) \left. \right] \left[ (e^{\beta_L h_L} + 1)(9131e^{\beta_L h_L} \right. \\
& + 8810e^{2\beta_L h_L} + 2807e^{3\beta_L h_L} + 26894e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 26569e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 8692e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} \\
& + 26569e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 26894e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 9013e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 8810e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} \\
& \left. + 9131e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 3124e^{3\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 9013e^{\beta_R h_R} + 8692e^{2\beta_R h_R} + 2807e^{3\beta_R h_R} + 3124 \right]^{-1}
\end{aligned} \tag{6.38}$$

$$\begin{aligned}
\dot{W}_R = & - \left[ 2(e^{\beta_L h_L} - e^{\beta_R h_R})(284(3h_R + 7)e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + (2619h_R + 4663)e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + (2672h_R \right. \\
& + 3226)e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + (2761h_R - 1379)e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} + (8335h_R - 9729)e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + (8335h_R \\
& - 6941)e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + (905h_R - 2373)e^{3\beta_L h_L} + (2619h_R - 9901)e^{\beta_L h_L} + (2672h_R - 8570)e^{2\beta_L h_L} \\
& + (905h_R + 563)e^{2\beta_R h_R} + (2761h_R - 4143)e^{\beta_R h_R} + 284(3h_R - 13) \left. \right] \left[ (e^{\beta_L h_L} + 1)(9131e^{\beta_L h_L} \right. \\
& + 8810e^{2\beta_L h_L} + 2807e^{3\beta_L h_L} + 26894e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 26569e^{2\beta_L h_L + \beta_R h_R} + 8692e^{3\beta_L h_L + \beta_R h_R} \\
& + 26569e^{\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 26894e^{2\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 9013e^{3\beta_L h_L + 2\beta_R h_R} + 8810e^{\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} \\
& \left. + 9131e^{2\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 3124e^{3\beta_L h_L + 3\beta_R h_R} + 9013e^{\beta_R h_R} + 8692e^{2\beta_R h_R} + 2807e^{3\beta_R h_R} + 3124 \right]^{-1}
\end{aligned} \tag{6.39}$$

Para o sistema em questão, é possível observar vários efeitos similares aos já mostrados nas figuras anteriores como mudança de regimes sob inversão  $f_L \leftrightarrow f_R$  ou  $\beta_L \leftrightarrow \beta_R$ , existência de variados comportamentos de retificação, produção de entropia não negativa, etc. Todavia, não explicitaremos os gráficos que mostram esses resultados pois são muito parecidos com os já exibidos. Todos esses resultados citados podem ser obtidos simplesmente plotando gráficos das equações 6.36, 6.37, 6.38 e 6.39 em função de  $h_L$ , escolhendo valores adequados para  $\beta_R$ ,  $\beta_L$  e  $h_R$ . Na figura 13 mostramos a diferença na corrente de energia e das taxas de inserção de calor e realização de trabalho sob a inversão  $f_L \leftrightarrow f_R$ . Foram escolhidos os parâmetros  $\beta_R$ ,  $\beta_L$  e  $h_R$  de forma que ficasse evidente a diferença na corrente de energia, em contraste com as figuras 8, 10 e 12.

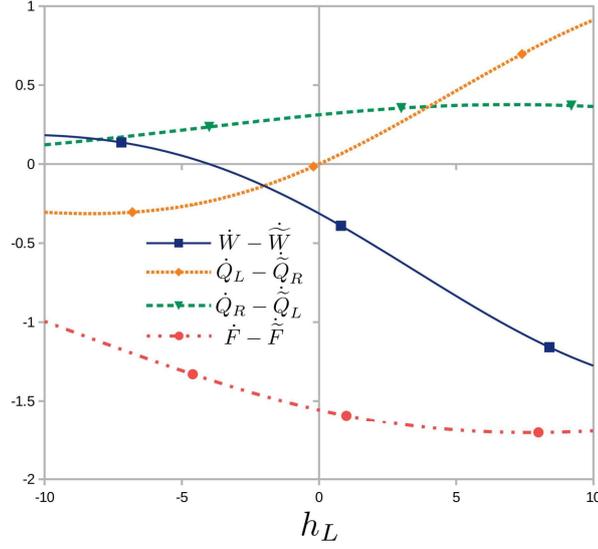


Figura 13 –  $\dot{Q}_L - \dot{Q}_R$ ,  $\dot{Q}_R - \dot{Q}_L$ ,  $\dot{W} - \dot{W}$  e  $F - \tilde{F}$  em função do campo  $h_L$  do spin do banho à esquerda na cadeia unidimensional do XXZ com hamiltoniano 6.26 e parâmetros  $\delta = h = \alpha = 1$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = -4$ ,  $\beta_R = 0.1$  e  $\beta_L = 1$ . No presente contexto, se uma função  $f = f(h_L, \beta_L, h_R, \beta_R)$  então  $\tilde{f} = f(h_R, \beta_R, h_L, \beta_L)$

## 6.2.2 N=2, h graded

Consideremos uma cadeia XXZ de dois spins com hamiltoniano dado por

$$H_S = \frac{h_1}{2}\sigma_1^z + \frac{h_2}{2}\sigma_2^z + \alpha(\sigma_1^x\sigma_2^x + \sigma_1^y\sigma_2^y) + \Delta\sigma_1^z\sigma_2^z \quad (6.40)$$

sujeita ao RIP com interações e hamiltoniano dos banhos dados pelas equações 6.2, 6.3 e 6.4, com  $\lambda_R = \lambda_L = \gamma$ . Para esse sistema com somente dois spins as contas são muito menores que o sistema com três spins, pois o estado quântico do sistema é, agora, uma matriz  $4 \times 4$  ao invés de  $8 \times 8$ , como no caso anterior. Sendo assim, foi possível estudar o sistema com um pouco mais de generalidade sem que os resultados fossem expressões muito grandes, tais como várias expressões da subseção anterior. Como consequência disso, nesta subseção mostraremos alguns resultados algébricos mais palatáveis ao leitor. Com os parâmetros acima definidos, calculamos o estado estacionário do sistema e, por conseguinte, as taxas de inserção de calor e realização de trabalho em ambos os lados da cadeia de spins

$$\dot{Q}_L = -\frac{32\gamma\alpha^2 h_L (e^{\beta_L h_L} - e^{\beta_R h_R})}{(e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1)(h_1^2 - 2h_1 h_2 + h_2^2 + 16(\gamma^2 + \alpha^2))} \quad (6.41)$$

$$\dot{Q}_R = \frac{32\gamma\alpha^2 h_R (e^{\beta_L h_L} - e^{\beta_R h_R})}{(e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1)(h_1^2 - 2h_1 h_2 + h_2^2 + 16(\gamma^2 + \alpha^2))} \quad (6.42)$$

$$\begin{aligned} \dot{W}_L = & - \left[ 16\gamma\alpha^2(e^{\beta_L h_L} - e^{\beta_R h_R})(h_1(e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1) + h_2(e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1)) \right. \\ & \left. - 4\Delta(e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} - 1) - 2h_L(e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1) \right] \left[ (e^{\beta_L h_L} + 1)^2(e^{\beta_R h_R} + 1)^2(h_1^2 \right. \\ & \left. - 2h_1 h_2 + h_2^2 + 16(\gamma^2 + \alpha^2)) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (6.43)$$

$$\begin{aligned} \dot{W}_R = & \left[ 16\gamma\alpha^2(e^{\beta_L h_L} - e^{\beta_R h_R})(h_1(e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1) + h_2(e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1)) \right. \\ & \left. - 4\Delta(e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} - 1) - 2h_R(e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1) \right] \left[ (e^{\beta_L h_L} + 1)^2(e^{\beta_R h_R} + 1)^2(h_1^2 \right. \\ & \left. - 2h_1 h_2 + h_2^2 + 16(\gamma^2 + \alpha^2)) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (6.44)$$

$$\dot{W} = \dot{W}_L + \dot{W}_R = \frac{32\gamma\alpha^2(h_L - h_R)(e^{\beta_L h_L} - e^{\beta_R h_R})}{(e^{\beta_L h_L} + 1)(e^{\beta_R h_R} + 1)(h_1^2 - 2h_1 h_2 + h_2^2 + 16(\gamma^2 + \alpha^2))} \quad (6.45)$$

A partir das equações acima podemos fazer o mesmo tipo de análise feita na subseção anterior e observar os efeitos de transporte de energia no sistema em questão. O primeiro resultado que queremos mostrar é que, tal como no sistema de três spins, a cadeia XXZ de dois spins sob o RIP com o tipo de interação considerada pode também apresentar diversos regimes termodinâmicos de funcionamento. Na figura 14 estão evidenciados cada um dos regimes de funcionamento nesse novo cenário considerado, onde os parâmetros foram escolhidos de tal maneira que visualmente ficasse clara a existência de vários regimes.

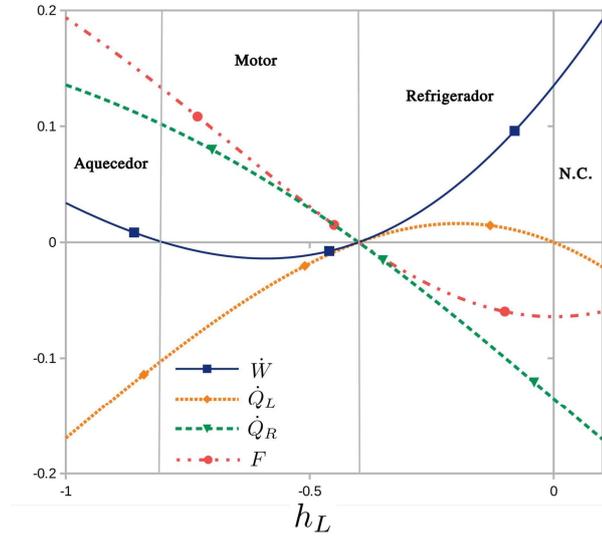


Figura 14 –  $\dot{Q}_L$ ,  $\dot{Q}_R$ ,  $\dot{W}$  e  $F$  em função do campo  $h_L$  do spin do banho à esquerda na cadeia unidimensional do XXZ com hamiltoniano 6.40 e parâmetros  $h_1 = \Delta = \alpha = 1$ ,  $h_2 = -1$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = -0.8$ ,  $\beta_R = 1$  e  $\beta_L = 0.5$ .

Um outro resultado interessante é que, para o sistema considerado, não há retificação sob a inversão dos banhos, ou seja, se fizermos  $\beta_L \leftrightarrow \beta_R$  e  $h_L \leftrightarrow h_R$  então a corrente de energia simplesmente troca de sinal e, conforme explicado no sétimo parágrafo da subseção

anterior,  $\dot{Q}_L = \dot{Q}_R$  e  $\dot{Q}_R = \dot{Q}_L$ , que caracteriza a ausência de retificação no sistema. Para as taxas de inserção de calor é simples visualizar esse resultado através das expressões 6.41 e 6.42. A corrente de energia é dada por:

$$F = \dot{W}_L + \dot{Q}_L = \dot{W}_R + \dot{Q}_R = \frac{4\gamma\Delta\alpha^2(e^{\beta_L h_L} - e^{\beta_R h_R})(e^{\beta_L h_L + \beta_R h_R} - 1)}{(\gamma^2 + \alpha^2)(e^{\beta_L h_L} + 1)^2(e^{\beta_R h_R} + 1)^2} \quad (6.46)$$

É fácil ver que sob a inversão  $\beta_L \leftrightarrow \beta_R$  e  $h_L \leftrightarrow h_R$ , as exponenciais no numerador da equação acima simplesmente trocam de lugar e, portanto, ocorre uma troca de sinal, isto é, não há retificação da energia total e, pela mesma análise das equações 6.41 e 6.42, não há retificação de calor no sistema.

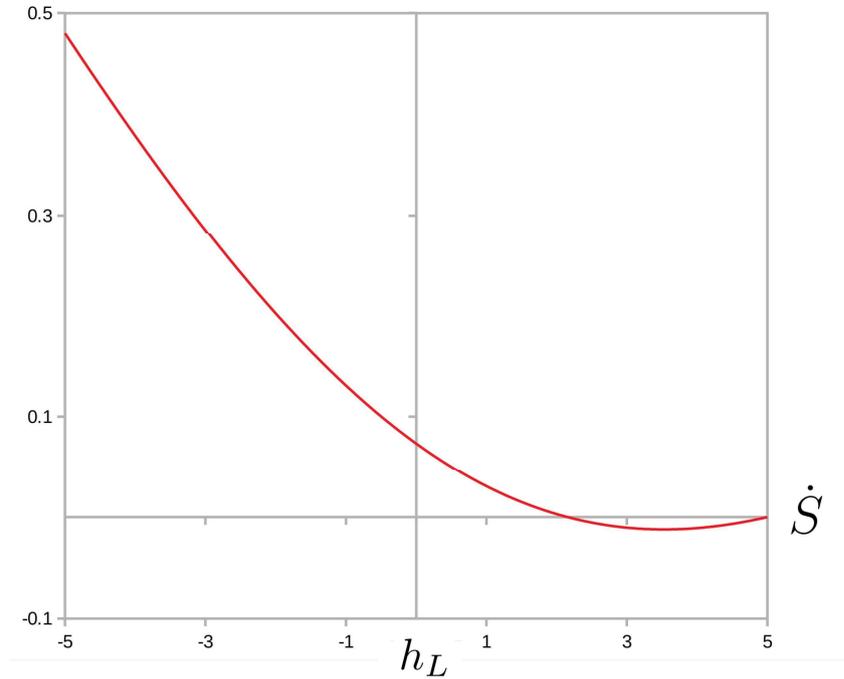


Figura 15 – Produção de entropia  $\dot{S}$  em função do campo  $h_L$  do spin do banho à esquerda na cadeia unidimensional do XXZ com do hamiltoniano 6.40 e parâmetros  $h_1 = h_2 = \alpha = 1$ ,  $\Delta = 10$ . Parâmetros dos banhos:  $\lambda_R = \lambda_L = 1$ ,  $h_R = 0.1$ ,  $\beta_R = 5$  e  $\beta_L = 0.1$ . A produção de entropia foi calculada considerando  $\alpha = 0.99$  na definição alternativa de energia interna 4.15

Em todas os resultados exibidos até o momento foi utilizado  $\alpha = 1$  na definição da energia interna 4.15. Havíamos adiantado que há uma definição da energia interna que conduz à resultados que são consistentes com a segunda lei da termodinâmica – o que de fato ocorreu até agora com todos os resultados – e que outras definições podem apresentar violações da segunda lei da termodinâmica, ou seja, os sistemas podem apresentar produção de entropia negativa. De acordo com a equação 4.22, se escolhermos  $\alpha \neq 0$  o calor inserido no sistema sofre uma alteração. Por conseguinte a produção de entropia 5.21 no sistema sofre também uma alteração. Na figura 15 exibimos uma configuração específica do XXZ

em que há uma região com produção de entropia negativa quando se escolhe  $\alpha \neq 1$ , ou seja, há uma violação da segunda lei da termodinâmica. Para todos os valores de  $\alpha \neq 1$  que testamos foi possível variar os parâmetros do hamiltoniano de tal forma a encontrar violações da segunda lei da termodinâmica. Isso pode indicar duas coisas: (i) há uma definição preferencial da energia interna do sistema ou (ii) a definição de produção de entropia não é adequada para esse caso.

## 7 Conclusões

Obtivemos diversos resultados inéditos e interessantes para a comunidade acadêmica dada a crescente atenção que os físicos, químicos e matemáticos tem dado à emergente área da termodinâmica quântica e à necessidade, imposta em grande parte pelo desenvolvimento dos computadores quânticos, de se levar em conta efeitos que o ambiente pode causar na dinâmica de um sistema quântico de interesse. Os principais resultados que obtivemos foram os seguintes: (i) exemplifica ao da não-unicidade da equação de Lindblad, (ii) exemplifica ao de regimes termodinâmicos e retificação na cadeia XXZ de spins sob o RIP, (iii) mostramos a existência do fenômeno de *one-way street* em condições mais gerais que as estudadas em [7] (iv) demonstra ao da consistência das informações sobre a energia obtidas pelo RIP ou pela equação de Lindblad e (v) existência de uma definição preferencial para a energia interna dadas as violações da segunda lei da termodinâmica induzidas por outras definições. A maior parte desses resultados foram obtidos tendo como objeto de estudo uma cadeia XXZ unidimensional de spins sob um protocolo de interações repetidas onde os sistemas auxiliares que repetidamente entram em contato com o sistema são também spins.

O primeiro desses resultados mostra que uma mesma equação de Lindblad pode ser obedecida por sistemas que interagem de forma distinta com seus ambientes. Os sistemas em si, que são regidos pela mesma equação de Lindblad, permanecerão em todo instante com o mesmo estado. Entretanto, somente com a informação sobre o estado do sistema não se é possível ter acesso a algumas grandezas termodinâmicas, como o calor e trabalho inseridos no sistema. Primeiramente mostramos que universos diferentes podem conduzir â equações de Lindblad iguais e, posteriormente, mostramos que em situações desse tipo é possível que os fluxos de calor e trabalho sejam também distintos quando os universos são distintos. Fica evidenciado, portanto, o quão indispensável é uma descrição que vá além do estado do sistema para se tratar de termodinâmica de alguns sistemas quânticos abertos.

Mostramos que cadeias XXZ unidimensionais com dois ou três spins podem apresentar comportamentos diversos, podendo funcionar como motor, refrigerador ou aquecedor, dependendo da escolha de parâmetros e do tipo de interação com o ambiente. Essa descoberta pode despertar o interesse da comunidade em investigar ainda mais esse tipo de sistema, com o foco no estudo do rendimento ou performance desses modelos e de possíveis testes experimentais e utilizações em aplicações tecnológicas. Diferente do que foi feito em [7], mostramos uma situa ao em que o fenômeno de *one-way street* existe para  $f_L$  e  $f_R$  arbitrários, sem a restrição de que  $f_L = -f_R$ . Como dito ao longo do texto, não foi feita uma demonstra ao que mostra a existência do efeito de *one-way street* em um contexto tao geral tal como o já estudado por Pereira. Todavia, acreditamos que essa seja a situa

ao e esse assunto sera investigado posteriormente.

Como definir matematicamente as grandezas relevantes na termodinâmica quântica é um dos problemas que ainda intriga os pesquisadores da área, principalmente quando a energia de interação entre o sistema de interesse e o ambiente não pode ser desprezada. Mostramos que para varias definições possíveis a informação sobre a energia do sistema obtida pela equação de Lindblad coincide com a informação obtida através do RIP, independente da escolha da definição. A demonstração foi feita para hamiltonianos do sistema e ambiente arbitrários e com um tipo específico de interação que é frequentemente utilizado no estudo de sistemas quânticos abertos. Não obstante, mostramos que, assumindo as definições de Esposito et al. sobre entropia e produção de entropia do sistema [10], existe uma definição preferencial da energia do sistema. Mostramos que, em uma cadeia XXZ unidimensional de dois spins, as outras definições conduzem a violações da segunda lei da termodinâmica.

Esses resultados contribuem para um melhor entendimento do exótico universo quântico e podem orientar futuras pesquisas nessa área: análise de condições mais gerais para existência do fenômeno de *one-way street*, estudo de eficiência de máquinas térmicas quânticas, investigações sobre a natureza do calor e da entropia, investigações sobre o surgimento de irreversibilidade a nível microscópico, estudo de condições de unicidade na equação de Lindblad, dentre outros.

# Referências

- [1] Starr, Chauncey: *The Copper Oxide Rectifier*. Physics, 7(1):15–19, 1936. <https://doi.org/10.1063/1.1745338>. Citado na página 10.
- [2] Pereira, Emmanuel: *Graded anharmonic crystals as genuine thermal diodes: Analytical description of rectification and negative differential thermal resistance*. Phys. Rev. E, 82:040101, Oct 2010. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.82.040101>. Citado na página 10.
- [3] Landi, Gabriel T, E Novais, Mário J de Oliveira e Dragi Karevski: *Flux rectification in the quantum  $XXZ$  chain*. Physical Review E, 90(4):042142, 2014. Citado na página 11.
- [4] Mendoza-Arenas, JJ, S Al-Assam, SR Clark e D Jaksch: *Heat transport in the  $XXZ$  spin chain: from ballistic to diffusive regimes and dephasing enhancement*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2013(07):P07007, 2013. Citado na página 11.
- [5] Barra, Felipe: *The thermodynamic cost of driving quantum systems by their boundaries*. Scientific reports, 5:14873, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 12.
- [6] De Chiara, Gabriele, 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, 2018. Citado na página 11.
- [7] Schuab, Lucas, Emmanuel Pereira e Gabriel T Landi: *Energy rectification in quantum graded spin chains: Analysis of the  $XXZ$  model*. Physical Review E, 94(4):042122, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 71.
- [8] Pereira, Emmanuel: *Heat, work, and energy currents in the boundary-driven  $XXZ$  spin chain*. Physical Review E, 97(2):022115, 2018. Citado 3 vezes nas páginas 11, 12 e 13.
- [9] Pereira, Emmanuel: *Rectification and one-way street for the energy current in boundary-driven asymmetric quantum spin chains*. Physical Review E, 95(3):030104, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 55.
- [10] Esposito, Massimiliano, Katja Lindenberg e Christian Van den Broeck: *Entropy production as correlation between system and reservoir*. New Journal of Physics, 12(1):013013, 2010. Citado na página 72.